



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2014-0076522  
 (43) 공개일자 2014년06월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07D 471/10* (2006.01)  
*C07D 403/10* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2013-0154822  
 (22) 출원일자 2013년12월12일  
 심사청구일자 없음  
 (30) 우선권주장  
 1020120144416 2012년12월12일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
**에스에프씨 주식회사**  
 충청북도 청원군 오창읍 과학산업5로 89  
 (72) 발명자  
**이세진**  
 대전광역시 동구 성동로7번길 52-1 (자양동)  
**김수진**  
 강원도 춘천시 후석로 270 1층 (후평동)  
 (74) 대리인  
**특허법인충현**

전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 발명의 명칭 **유기전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자**

**(57) 요약**

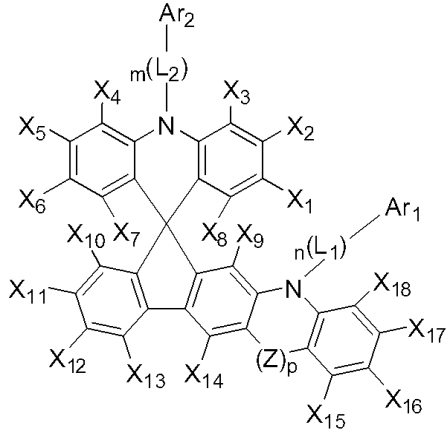
본 발명은 유기전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 열적 안정성이 우수하고, 정공과 전자 수송능이 높을 뿐 아니라, 전력효율과 구동전압 특성이 우수할 뿐만 아니라, 입체 장애 및 분자 회합에 따른 농도 소광의 문제가 전혀 발생하지 않는 효과를 보인다.

**특허청구의 범위**

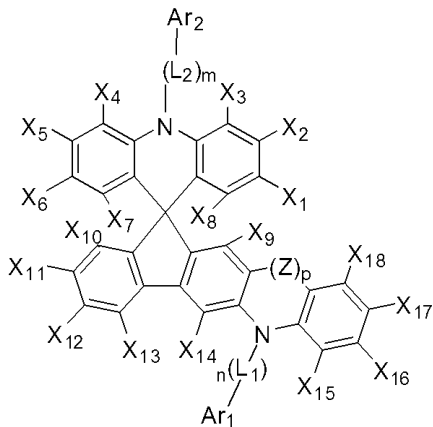
**청구항 1**

하기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2]로 표시되는 유기전계 발광 화합물:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



상기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2]에서,

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>18</sub>은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, -SiRRR 및 -NRR 중에서 선택되며,

L<sub>1</sub>과 L<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 단일결합이거나, 2가의 연결기로서 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이며,

Z는 단일결합이거나, CRR, O, S, SiRR 및 NR 중에서 선택되고,

n 및 m은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, p는 0 또는 1이며,

Ar<sub>1</sub>과 Ar<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되며, 적어도 하나의 헤테로아릴기를 포함하고,

상기 R은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알

킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택되며,

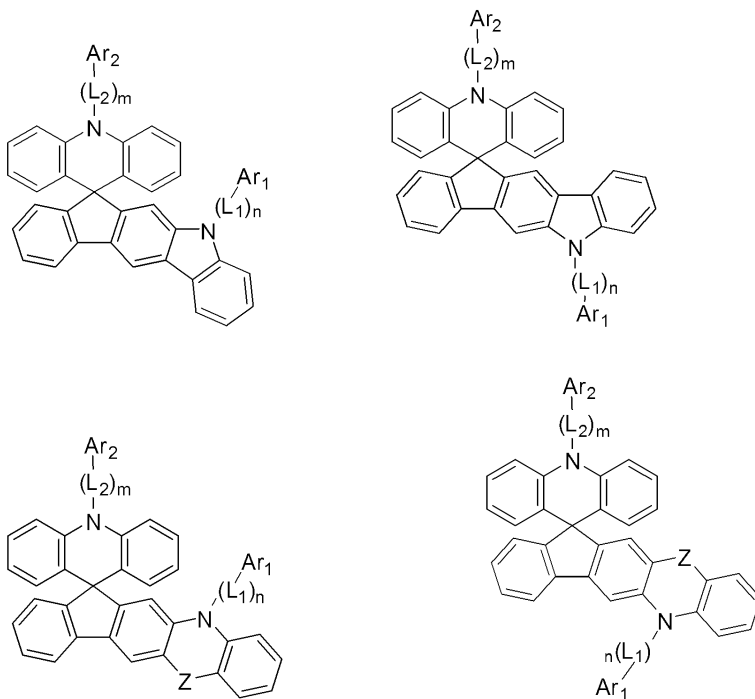
상기 치환기는 각각 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 혹은 불포화 고리를 형성할 수 있다.

### 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 WY-1] 중에서 선택된 1개의 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광 화합물:

[화학식 WY-1]



상기 [화학식 WY-1]에서,

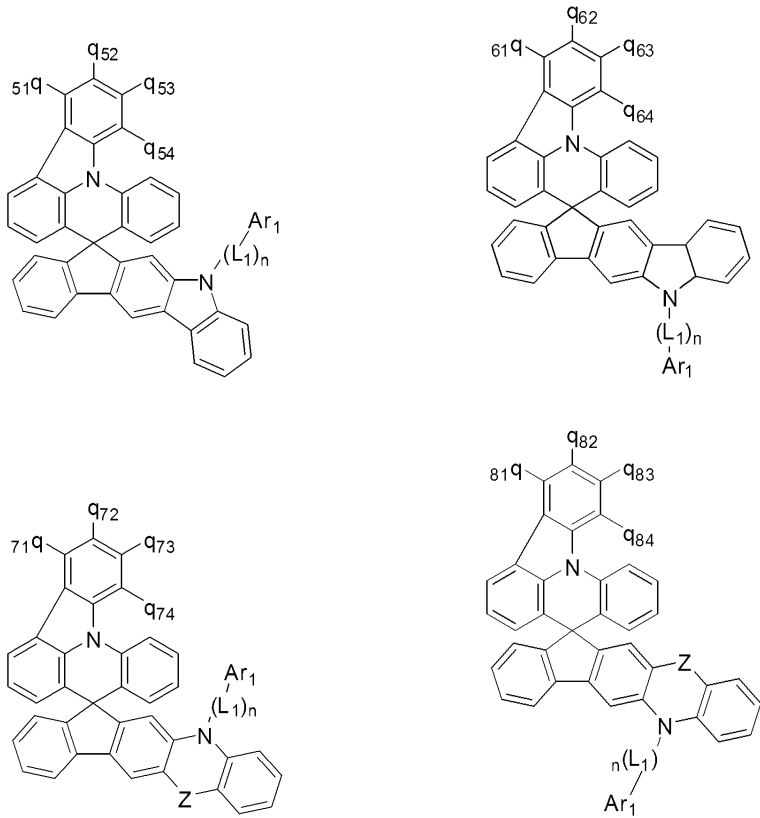
Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub> 및 Z는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 정의와 동일하다.

### 청구항 3

제1항에 있어서,

상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 VWY-1] 중에서 선택된 1개의 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광 화합물:

[화학식 VWY-1]



상기 [화학식 VWY-1]에서,

Ar<sub>1</sub>, L<sub>1</sub>, n, Z는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 정의와 동일하고,

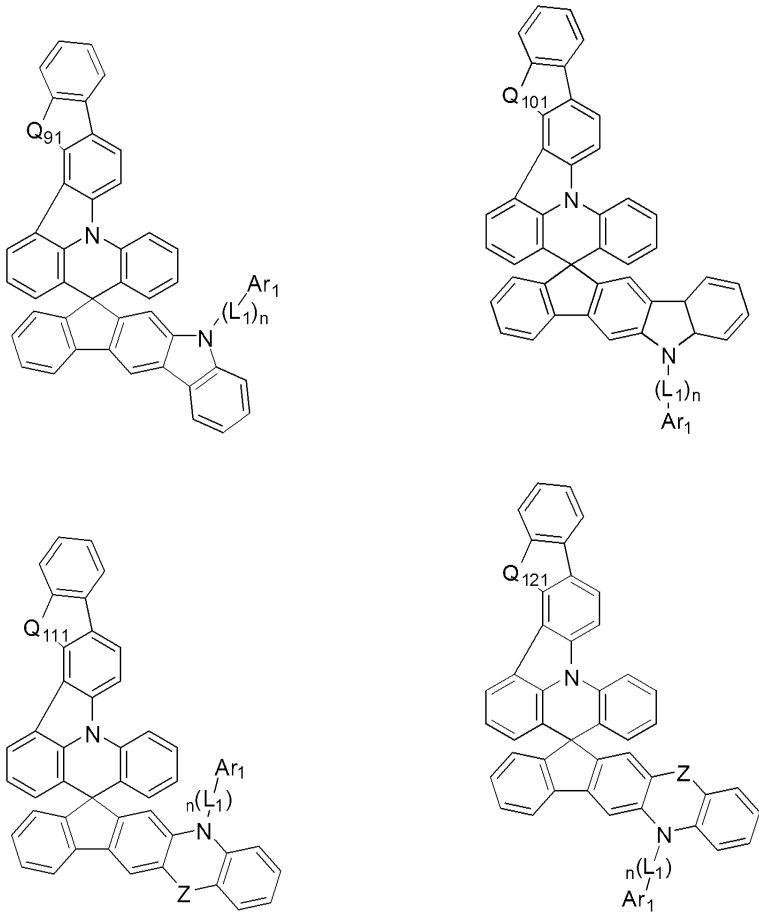
q<sub>51</sub> 내지 q<sub>84</sub>는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택되고, 상기 치환기는 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

**청구항 4**

제1항에 있어서,

상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 VWY-2] 중에서 선택된 1개의 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광 화합물:

[화학식 VWY-2]



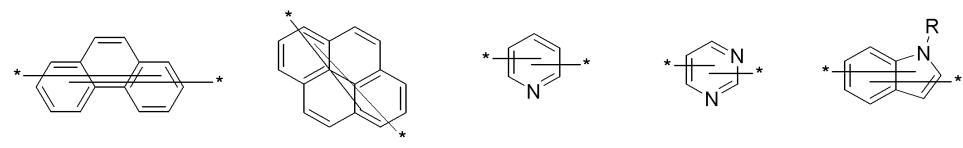
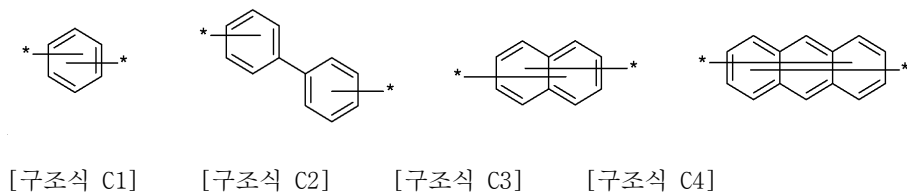
상기 [화학식 VWY-2]에서,

Ar<sub>1</sub>, L<sub>1</sub>, n, Z는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 정의와 동일하고, Q<sub>91</sub> 내지 Q<sub>121</sub>은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 상기 [화학식 VWY-1]에서의 정의와 동일하다.

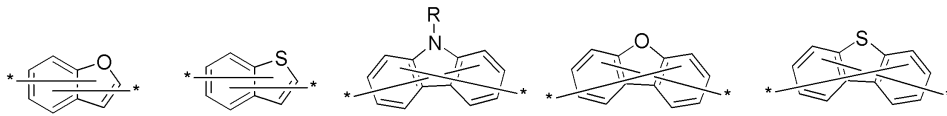
**청구항 5**

제1항에 있어서,

상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]에서의 L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C14] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광 화합물:



[구조식 C5] [구조식 C6] [구조식 C7] [구조식 C8] [구조식 C9]



[구조식 C10] [구조식 C11] [구조식 C12] [구조식 C13] [구조식 C14]

상기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C14]에서,

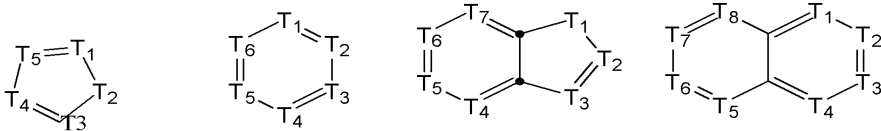
각 구조식 내 고리의 탄소자리에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있으며, 상기 R은 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2]에서의 R 정의와 동일하다.

**청구항 6**

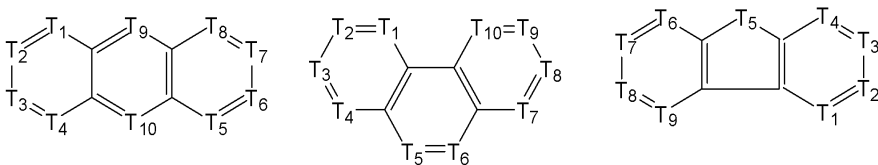
제1항에 있어서,

상기 L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>에 연결되는 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광 화합물:

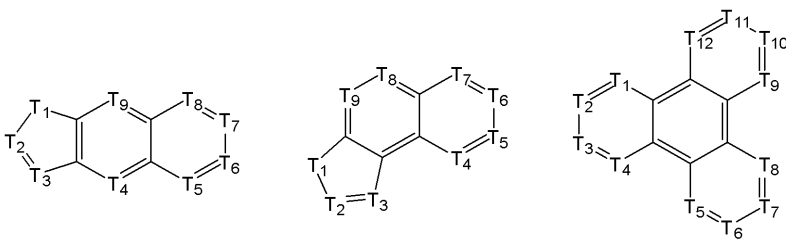
[구조식 1] [구조식 2] [구조식 3] [구조식 4]



[구조식 5] [구조식 6] [구조식 7]



[구조식 8] [구조식 9] [구조식 10]



상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

T<sub>1</sub> 내지 T<sub>12</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, C(R<sub>41</sub>), C(R<sub>42</sub>)(R<sub>43</sub>), N, N(R<sub>44</sub>), O 및 S 중에서 선택되며, 상기 R<sub>41</sub> 내지 R<sub>44</sub>는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

**청구항 7**

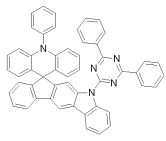
제6항에 있어서,

상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기

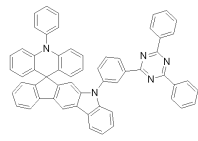


제1항에 있어서,

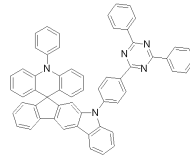
상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 101] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광 화합물:



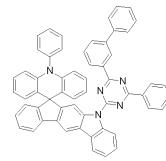
[화학식 2]



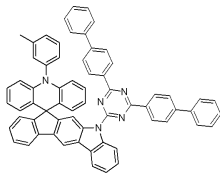
[화학식 3]



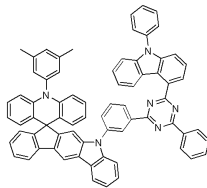
[화학식 4]



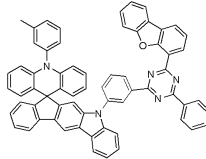
[화학식 5]



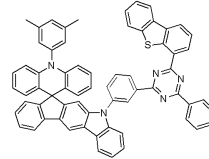
[화학식 6]



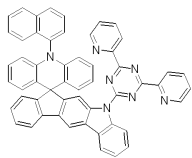
[화학식 7]



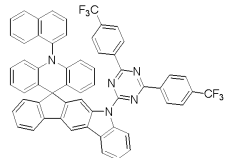
[화학식 8]



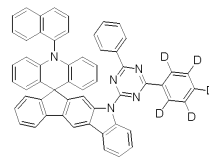
[화학식 9]



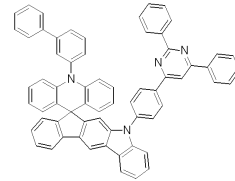
[화학식 10]



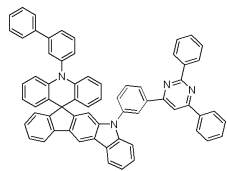
[화학식 11]



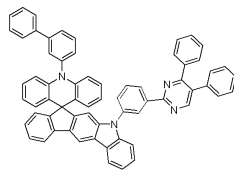
[화학식 12]



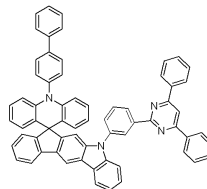
[화학식 13]



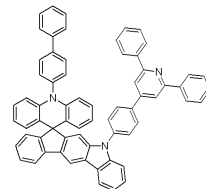
[화학식 14]



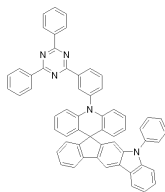
[화학식 15]



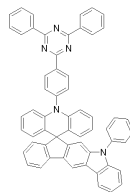
[화학식 16]



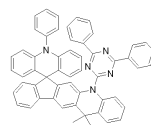
[화학식 17]



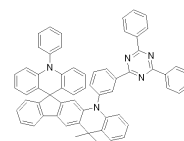
[화학식 18]



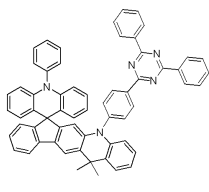
[화학식 19]



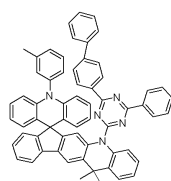
[화학식 20]



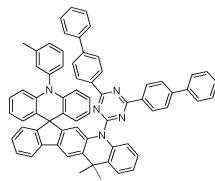
[화학식 21]



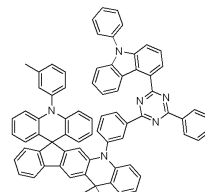
[화학식 22]



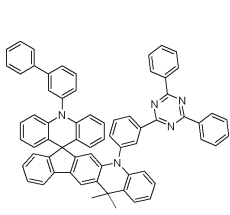
[화학식 23]



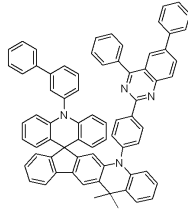
[화학식 24]



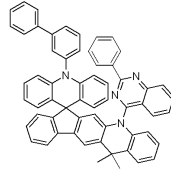
[화학식 25]



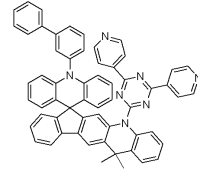
[화학식 26]



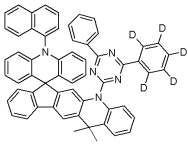
[화학식 27]



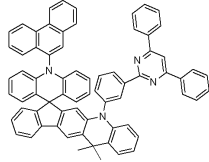
[화학식 28]



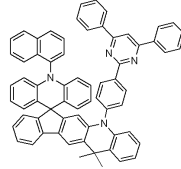
[화학식 29]



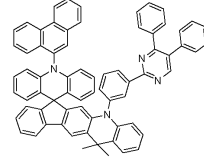
[화학식 30]



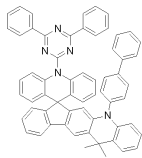
[화학식 31]



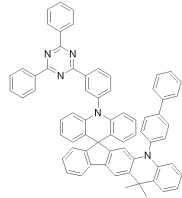
[화학식 32]



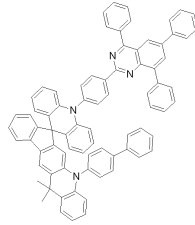
[화학식 33]



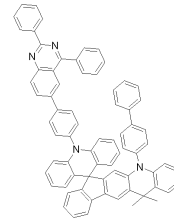
[화학식 34]



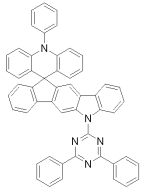
[화학식 35]



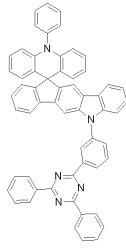
[화학식 36]



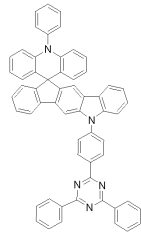
[화학식 37]



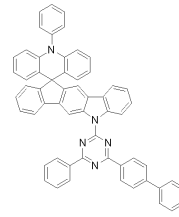
[화학식 38]



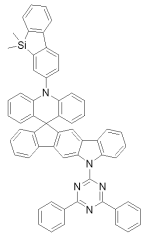
[화학식 39]



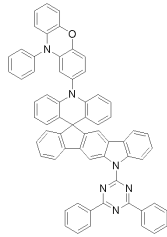
[화학식 40]



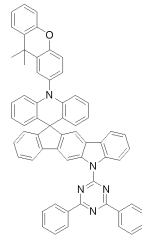
[화학식 41]



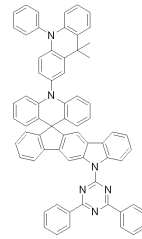
[화학식 42]



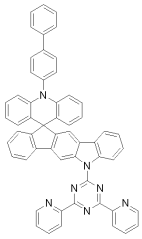
[화학식 43]



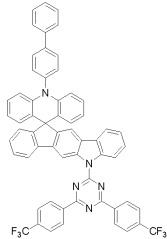
[화학식 44]



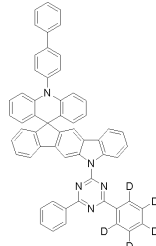
[화학식 45]



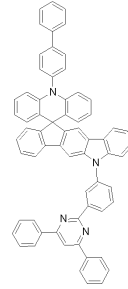
[화학식 46]



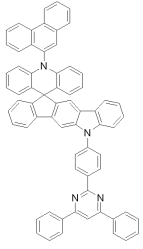
[화학식 47]



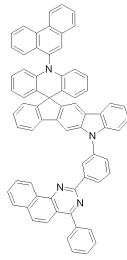
[화학식 48]



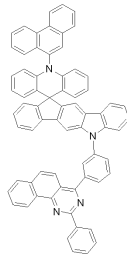
[화학식 49]



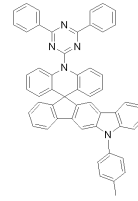
[화학식 50]



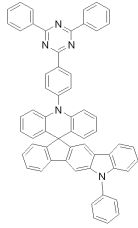
[화학식 51]



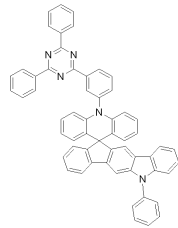
[화학식 52]



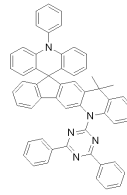
[화학식 53]



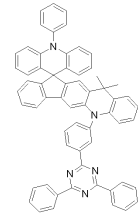
[화학식 54]



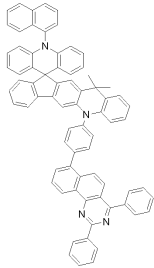
[화학식 55]



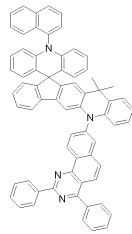
[화학식 56]



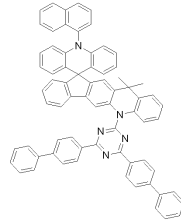
[화학식 57]



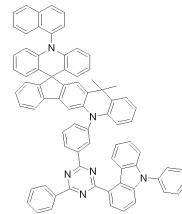
[화학식 58]



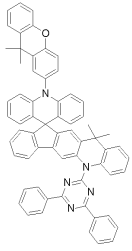
[화학식 59]



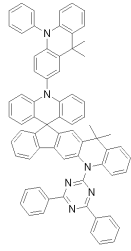
[화학식 60]



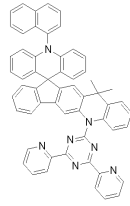
[화학식 61]



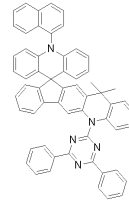
[화학식 62]



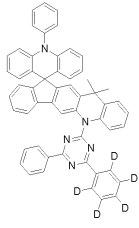
[화학식 63]



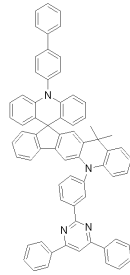
[화학식 64]



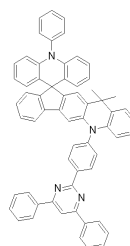
[화학식 65]



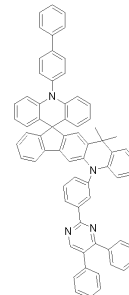
[화학식 66]



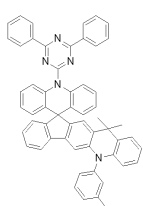
[화학식 67]



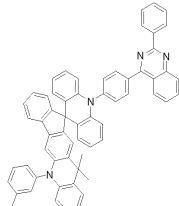
[화학식 68]



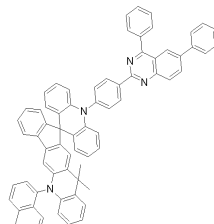
[화학식 69]



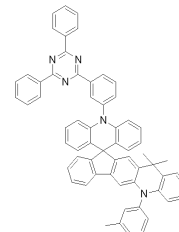
[화학식 70]



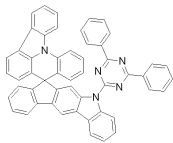
[화학식 71]



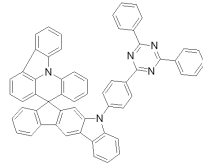
[화학식 72]



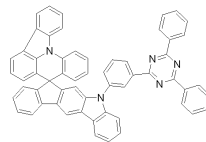
[화학식 73]



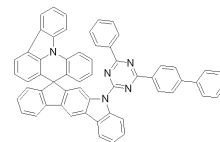
[화학식 74]



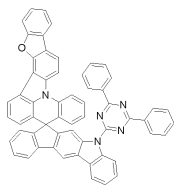
[화학식 75]



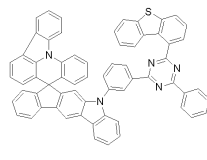
[화학식 76]



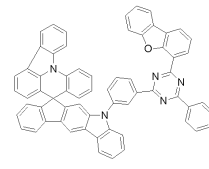
[화학식 77]



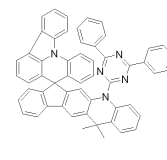
[화학식 78]



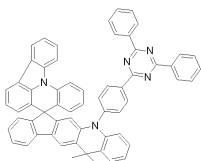
[화학식 79]



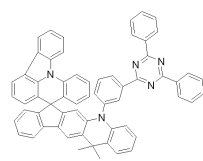
[화학식 80]



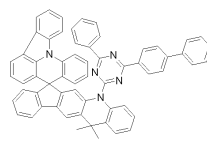
[화학식 81]



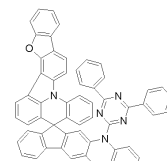
[화학식 82]



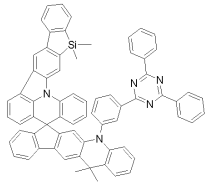
[화학식 83]



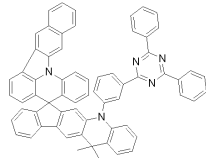
[화학식 84]



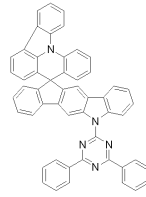
[화학식 85]



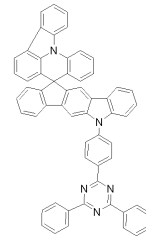
[화학식 86]



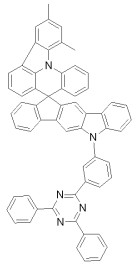
[화학식 87]



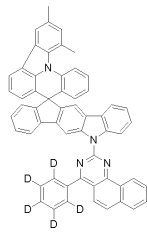
[화학식 88]



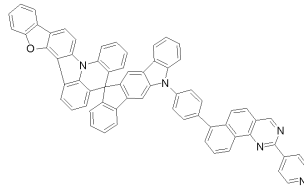
[화학식 89]



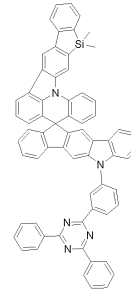
[화학식 90]



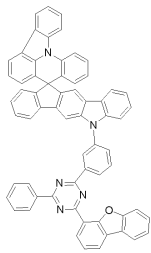
[화학식 91]



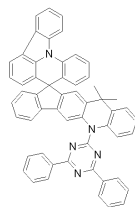
[화학식 92]



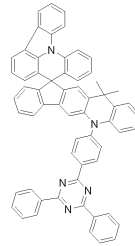
[화학식 93]



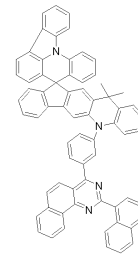
[화학식 94]



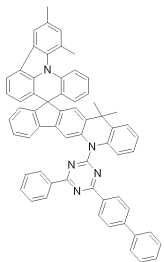
[화학식 95]



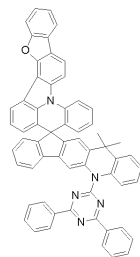
[화학식 96]



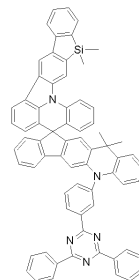
[화학식 97]



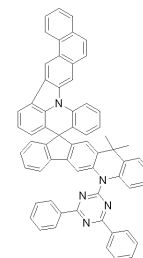
[화학식 98]



[화학식 99]



[화학식 100]



[화학식 101]

**청구항 9**

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자용 유기 박막층.

**청구항 10**

제9항에 있어서,

상기 유기 박막층은 상기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2]로 표시되는 유기발광 화합물을 호스트로 하고, 도펀트 화합물을 최소한 1개 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기박막층.

**청구항 11**

제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 제9항에 따른 유기 박막층;을 포함하는 유기전계발광소자.

**청구항 12**

제11항에 있어서,

상기 유기전계발광소자는 제1 전극과 제2 전극 사이에 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하고,

상기 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층 중의 하나가 제1항 내지 제 8항에 따른 유기 박막층인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**청구항 13**

제11항에 있어서,

상기 유기전계발광소자는 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기발광층을 하나 더 이상 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 유기전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 최근 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기 전계발광 소자는 평판 표시소자의 주류인 액정디스플레이(LCD, liquid crystal display)에 비해, 시야각, 대조비 등이 우수하고 백라이트가 불필요하며 경량 및 박형이 가능하고 소비전력 측면에서도 유리하며 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목받고 있다.

[0003] 유기전계발광소자(organic light emitting diodes, OLED)는 전자 주입 전극(음극)과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기 발광층에 전하를 주입하면 전자와 정공이 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 내는 소자이다.

[0004] 유기 발광 현상을 이용하는 유기전계발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 발광층, 전자전달층, 전자주입층, 전자저지층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기전계발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

[0005] 유기전계발광소자는 플라스틱 같은 휘 수 있는(flexible) 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널(Plasma Display Panel)이나 무기 전계 발광(EL) 디스플레이에 비해 10 V 이하의 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한, 유기전계발광소자는 녹색, 청색, 적색의 3가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0006] 유기전계발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기전계발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 당 기술분야에서는 저전압 구동, 고효율 및 장수명을 갖는 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있는 실정이다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0007] 위와 같은 종래 기술적 문제를 해결하여, 열적 안정성이 우수하고, 정공과 전자 수송능이 높을 뿐 아니라, 전력

효율과 구동전압 특성이 우수하여 장시간(예: 100 시간 이상) 전계 인가 시에도 쇼트에 의한 화소 결함의 문제가 전혀 발생하지 않는 유기전계 발광 화합물을 제공하고자 한다.

[0008] 또한, 결정질화 문제도 전혀 발생하지 않고, 고온에서의 발광 균일성도 확보될 수 있을 뿐 아니라, 별도의 증점제를 사용하지 않고도 용해도가 용매에 대하여 3% 이상을 발현할 수 있어 용액 도포법에 의한 막 형성이 가능한 유기전계 발광 화합물을 제공하고자 한다.

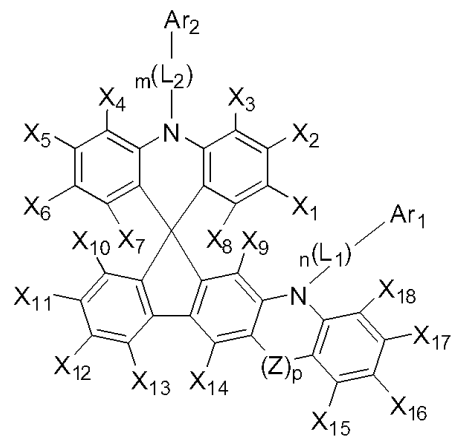
[0009] 또한, 이러한 유기전계 발광 화합물을 포함하는 유기전계발광소자용 유기 박막층 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

**과제의 해결 수단**

[0010] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2]로 표시되는 유기전계 발광 화합물을 제공한다.

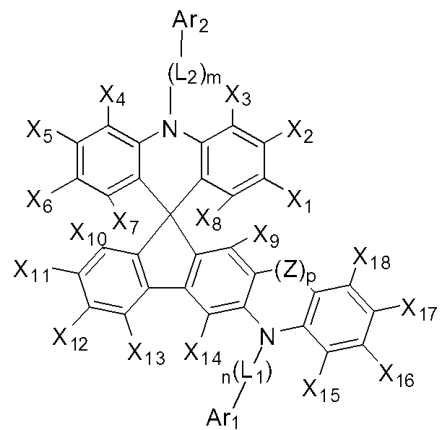
[0011] 하기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 각 치환기 또는 골격 원자에 대한 정의는 후술하기로 한다.

[0012] [화학식 1-1]



[0013]

[0014] [화학식 1-2]



[0015]

[0016] 또한, 본 발명은 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 구현되는 유기전계 발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 유기전계발광소자용 유기 박막층 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0017] 본 발명의 여러 구현예에 따른 유기전계 발광 화합물은 열적 안정성이 우수하고, 정공과 전자 수송능이 높을 뿐 아니라, 전력효율과 구동전압 특성이 우수하여 장시간(예: 100 시간 이상) 전계 인가 시 쇼트에 의한 화소 결함의 문제가 전혀 발생하지 않음을 확인하였다.

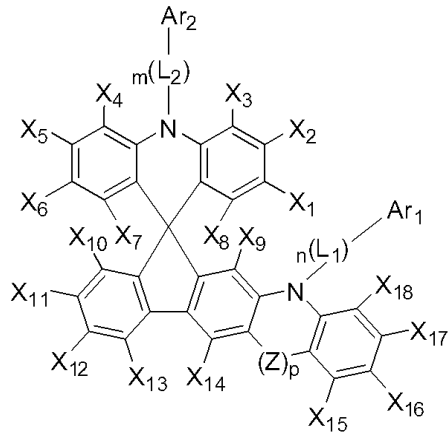
[0018] 또한, 본 발명의 일부 구현예에 따른 유기전계 발광 화합물은 결정질화 문제도 전혀 발생하지 않고, 고온에서의 발광 균일성도 확보될 수 있을 뿐 아니라, 별도의 증점제를 사용하지 않고도 용해도가 용매에 대하여 3% 이상을 발현할 수 있어 용액 도포법에 의한 막 형성이 가능함을 확인하였다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0019] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

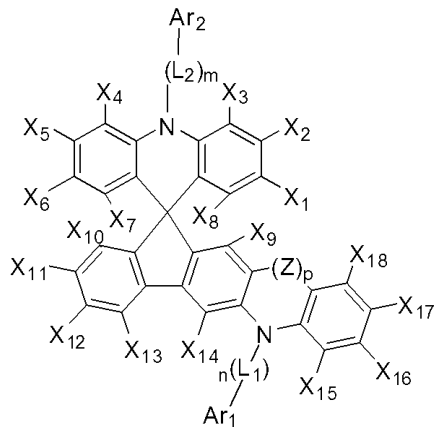
[0020] 본 발명의 일 측면은 하기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2]로 표시되는 유기 전계발광 화합물에 관한 것이다.

[0021] [화학식 1-1]



[0022]

[0023] [화학식 1-2]



[0024]

[0025] 상기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2]에서,

[0026] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>18</sub>은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, -SiRRR 및 -NRR 중에서 선택된다.

[0027] L<sub>1</sub>과 L<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 단일결합이거나, 2가의 연결기로서 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이며, Z는 단일결합이거나, CRR, O, S, SiRR 및 NR 중에서 선택된다.

[0028] 상기 n 및 m은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 상기 p는 0 또는 1이다.

[0029] Ar<sub>1</sub>과 Ar<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 및 치

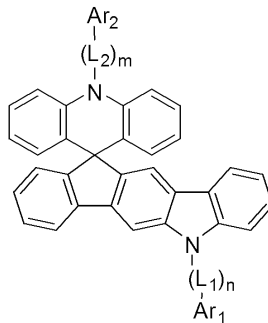
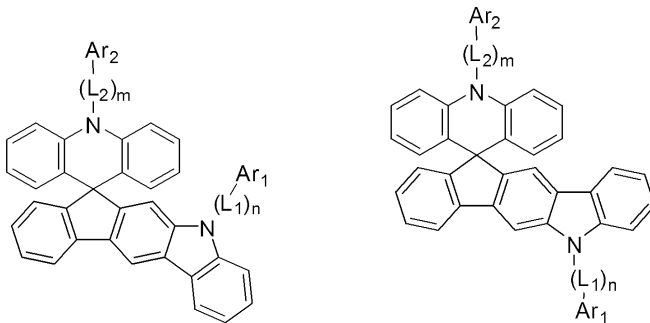
환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 치환기로서, 적어도 하나의 헤테로아릴기를 포함한다.

[0030] 상기 R은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택된다.

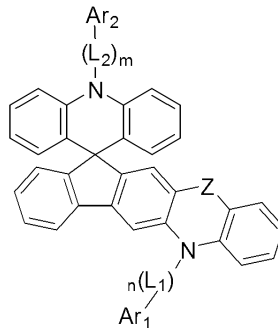
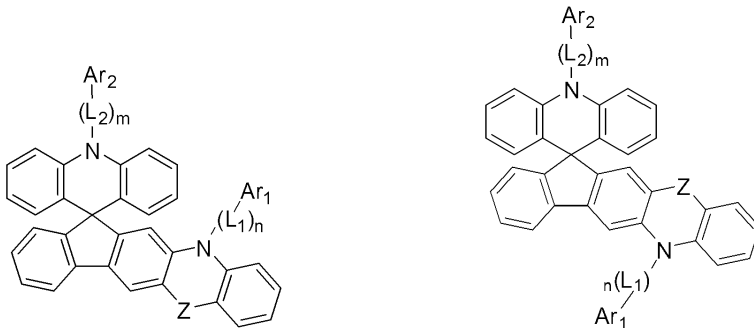
[0031] 또한, 상기 치환기는 각각 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 혹은 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0032] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 WY-1] 중에서 선택된 1개의 구조를 갖는 것을 특징으로 한다.

[0033] [화학식 WY-1]



[0034]



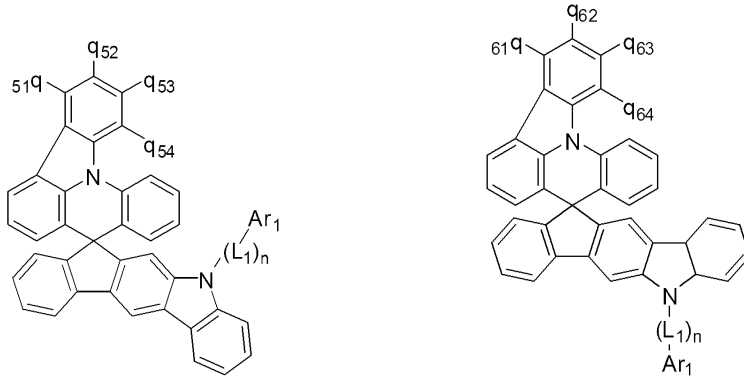
[0035]

[0036] 상기 [화학식 WY-1]에서,

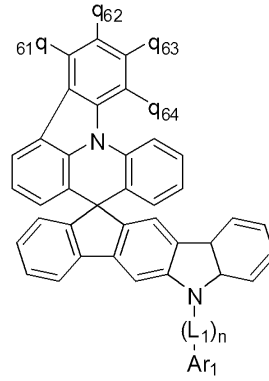
[0037] Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub> 및 Z는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 정의와 동일하다.

[0038] 본 발명의 다른 구현예에 따르면, 상기 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 VWY-1] 중에서 선택된 1개의 구조를 갖는 것을 특징으로 한다.

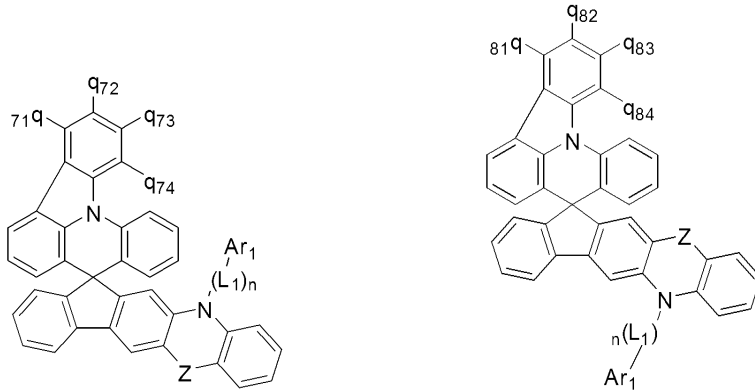
[0039] [화학식 VWY-1]



[0040]



[0041]



[0042]

[0043]

[0044]

상기 [화학식 VWY-1]에서,

Ar<sub>1</sub>, L<sub>1</sub>, n, Z는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 정의와 동일하고,

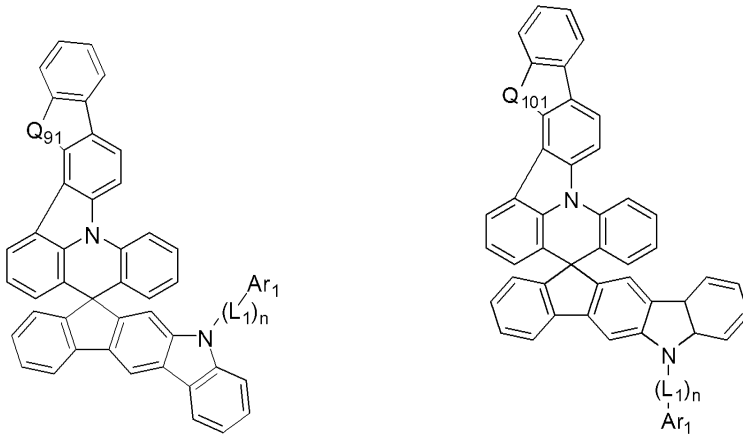
q<sub>51</sub> 내지 q<sub>84</sub>는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택되고, 상기 치환기는 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0045]

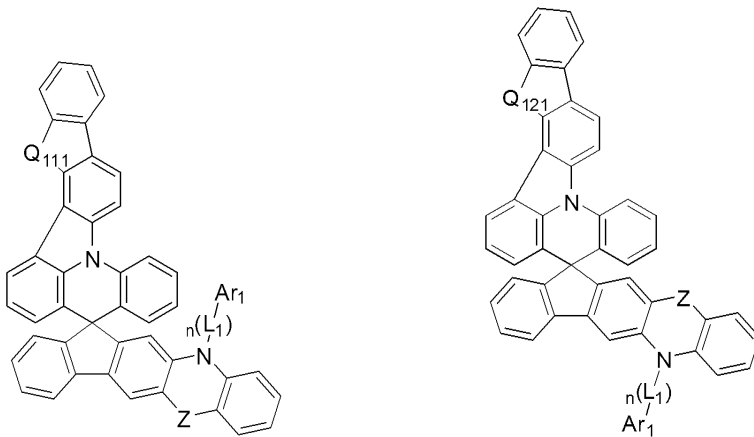
본 발명의 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 VWY-2] 중에서 선택된 1개의 구조를 갖는 것을 특징으로 한다.

[0046]

[화학식 VWY-2]



[0047]

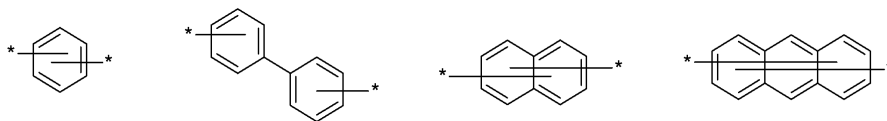


[0048]

[0049] 상기 [화학식 VVY-2]에서,

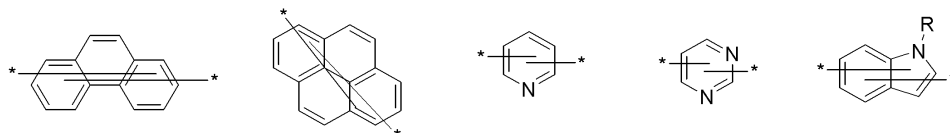
[0050] Ar<sub>1</sub>, L<sub>1</sub>, n, Z는 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]의 정의와 동일하고, Q<sub>91</sub> 내지 Q<sub>121</sub>은 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 상기 [화학식 VVY-1]에서의 정의와 동일하다.

[0051] 또한, 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]에서의 L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C14] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.



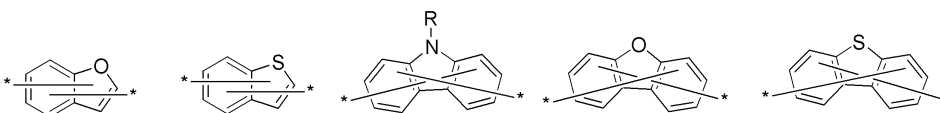
[0052]

[0053] [구조식 C1] [구조식 C2] [구조식 C3] [구조식 C4]



[0054]

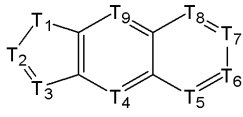
[0055] [구조식 C5] [구조식 C6] [구조식 C7] [구조식 C8] [구조식 C9]



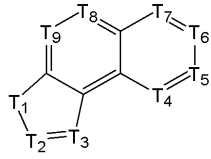
[0056]



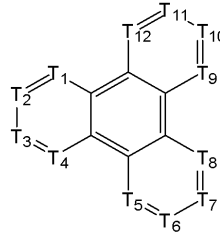
[0069] [구조식 8]



[구조식 9]



[구조식 10]



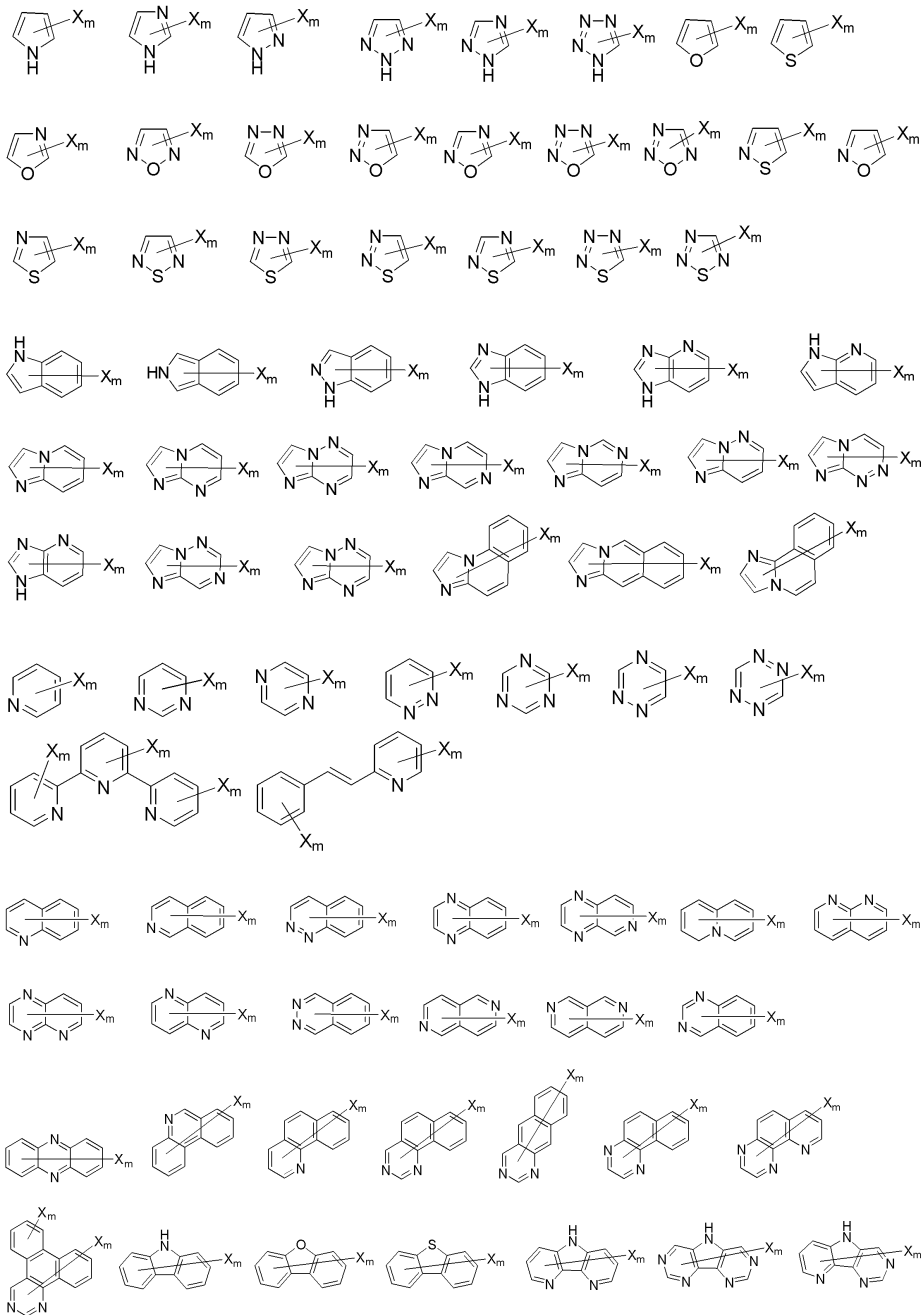
[0070]

[0071] 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

[0072]  $T_1$  내지  $T_{12}$ 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로,  $C(R_{41})$ ,  $C(R_{42})(R_{43})$ , N,  $N(R_{44})$ , O 및 S 중에서 선택되며, 상기  $R_{41}$  내지  $R_{44}$ 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

[0073] 보다 바람직하게는 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0074] [구조식 11]



[0075]

[0076] 상기 [구조식 11]에서,

[0077]

X는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기 및 할로겐기 중에서 선택되고, m 은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하다.

[0078]

본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 스테아릴기, 트리클로로메틸기, 트리플루오르메틸기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로겐 원자,

히드록시기, 니트로기, 시아노기, 트리플루오로메틸기, 실릴기(이 경우 "알킬실릴기"라 함), 치환 또는 비치환된 아미노기(-NH<sub>2</sub>, -NH(R), -N(R')(R'')), 여기서 R, R' 및 R''은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 24의 알킬기임(이 경우 "알킬아미노기"라 함)), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알킬닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.

[0079] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 이소부틸옥시기, sec-부틸옥시기, 펜틸옥시기, iso-아밀옥시기, 헥실옥시기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

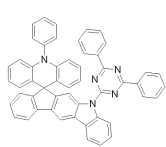
[0080] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 할로겐기의 구체적인 예로는 플루오르(F), 클로린(Cl), 브롬(Br) 등을 들 수 있다.

[0081] 본 발명에 사용되는 치환기인 아릴옥시기는 -O- 아릴 라디칼을 의미하며, 이때 아릴기는 상기에서 정의된 바와 같고, 구체적인 예로서 페녹시, 나프톡시, 안트라세닐옥시, 페난트레닐옥시, 플루오레닐옥시, 인데닐옥시 등을 들 수 있고, 아릴옥시기에 포함되어 있는 하나 이상의 수소 원자는 추가로 치환가능하다.

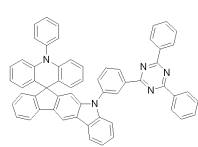
[0082] 본 발명에 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로부틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있다.

[0083] 본 발명에 사용되는 알케닐기의 구체적인 예로는 직쇄상 또는 분지쇄상의 알케닐기를 나타내고, 3-펜테닐기, 4-헥세닐기, 5-헵테닐기, 4-메틸-3-펜테닐기, 2,4-디메틸-펜테닐기, 6-메틸-5-헵테닐기, 2,6-디메틸-5-헵테닐기 등을 들 수 있다

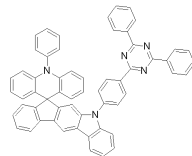
[0084] 본 발명의 바람직한 구현예에 따르면, 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 유기전계 발광 화합물은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 101] 중에서 선택된 것임을 특징으로 하는 유기 전계발광 화합물이 제공된다.



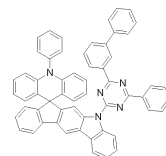
[화학식 2]



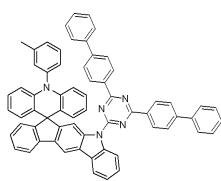
[화학식 3]



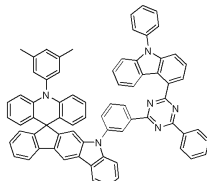
[화학식 4]



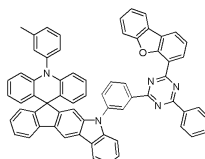
[화학식 5]



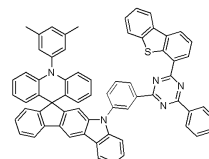
[화학식 6]



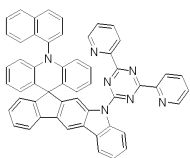
[화학식 7]



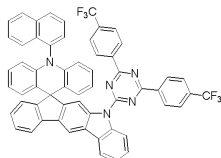
[화학식 8]



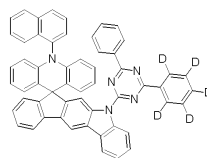
[화학식 9]



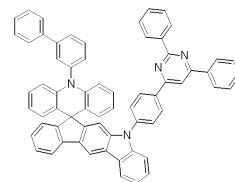
[화학식 10]



[화학식 11]

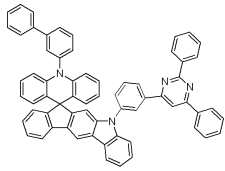


[화학식 12]

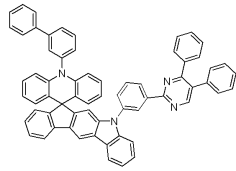


[화학식 13]

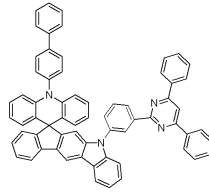
[0085]



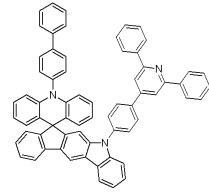
[화학식 14]



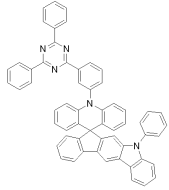
[화학식 15]



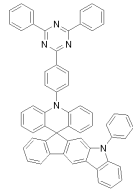
[화학식 16]



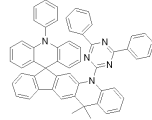
[화학식 17]



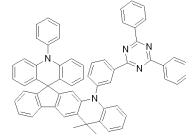
[화학식 18]



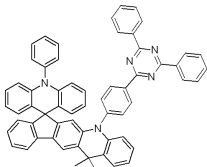
[화학식 19]



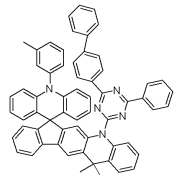
[화학식 20]



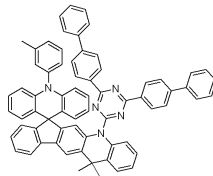
[화학식 21]



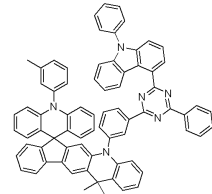
[화학식 22]



[화학식 23]

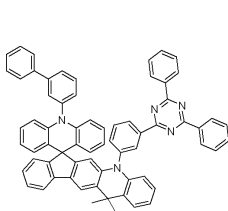


[화학식 24]

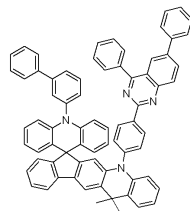


[화학식 25]

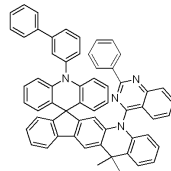
[0086]



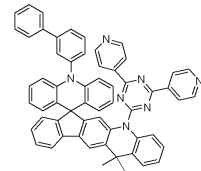
[화학식 26]



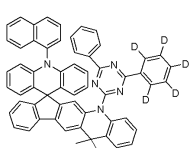
[화학식 27]



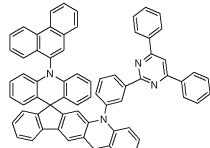
[화학식 28]



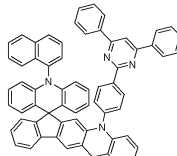
[화학식 29]



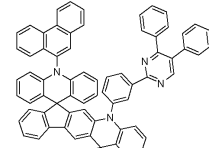
[화학식 30]



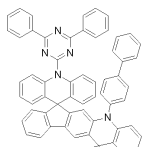
[화학식 31]



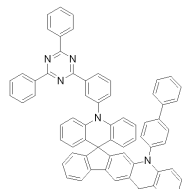
[화학식 32]



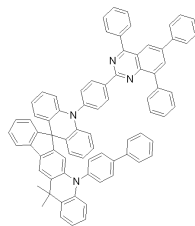
[화학식 33]



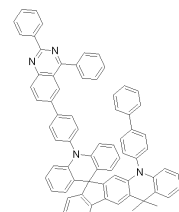
[화학식 34]



[화학식 35]

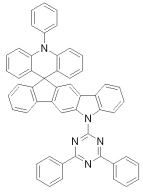


[화학식 36]

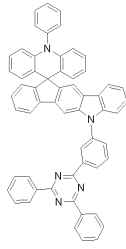


[화학식 37]

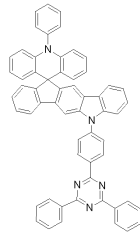
[0087]



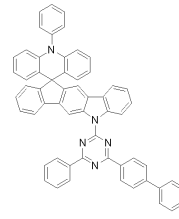
[화학식 38]



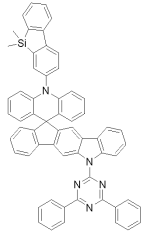
[화학식 39]



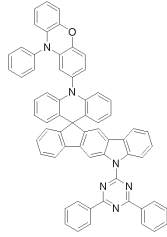
[화학식 40]



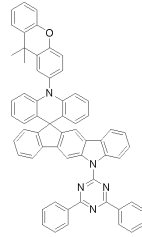
[화학식 41]



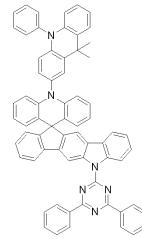
[화학식 42]



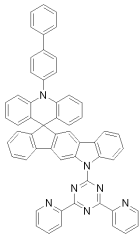
[화학식 43]



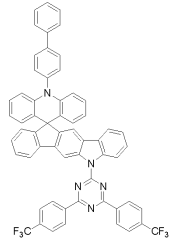
[화학식 44]



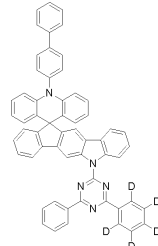
[화학식 45]



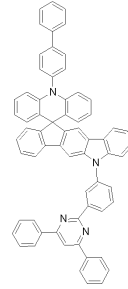
[화학식 46]



[화학식 47]

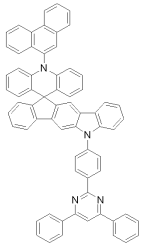


[화학식 48]

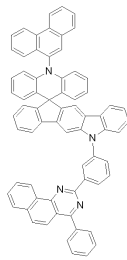


[화학식 49]

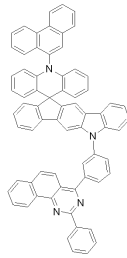
[0088]



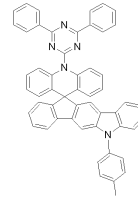
[화학식 50]



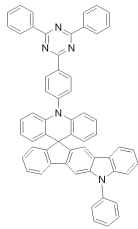
[화학식 51]



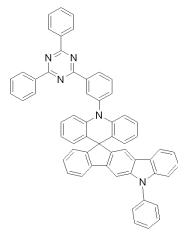
[화학식 52]



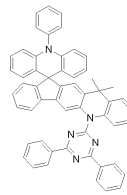
[화학식 53]



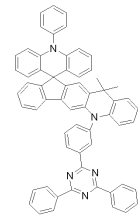
[화학식 54]



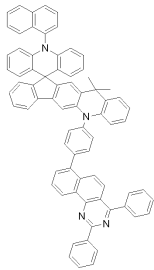
[화학식 55]



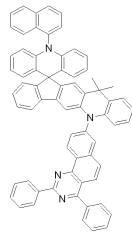
[화학식 56]



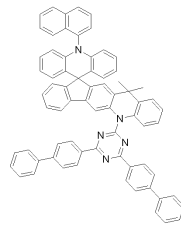
[화학식 57]



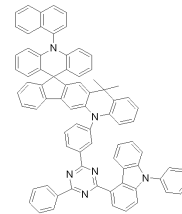
[화학식 58]



[화학식 59]

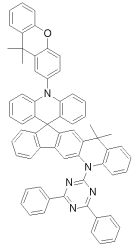


[화학식 60]

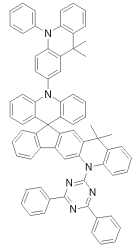


[화학식 61]

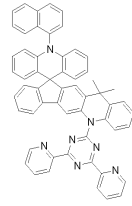
[0089]



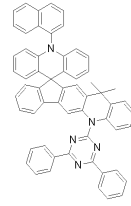
[화학식 62]



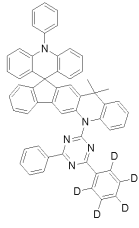
[화학식 63]



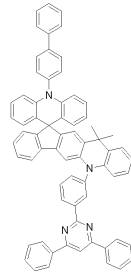
[화학식 64]



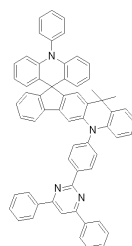
[화학식 65]



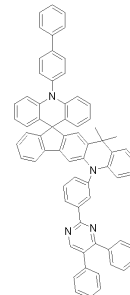
[화학식 66]



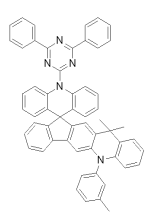
[화학식 67]



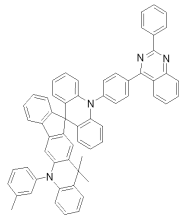
[화학식 68]



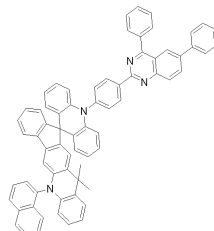
[화학식 69]



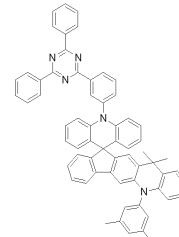
[화학식 70]



[화학식 71]

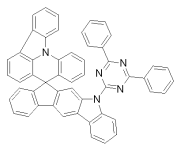


[화학식 72]

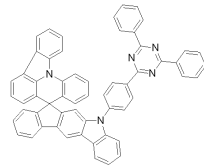


[화학식 73]

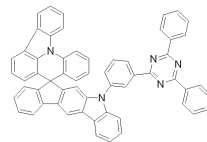
[0090]



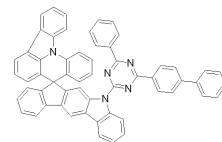
[화학식 74]



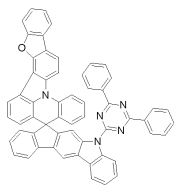
[화학식 75]



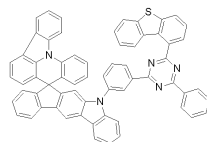
[화학식 76]



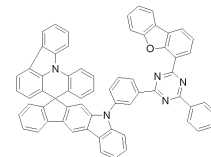
[화학식 77]



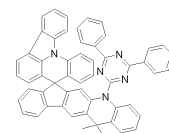
[화학식 78]



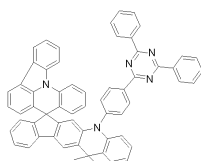
[화학식 79]



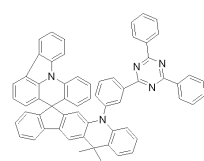
[화학식 80]



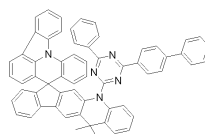
[화학식 81]



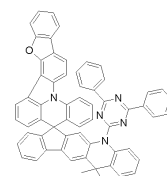
[화학식 82]



[화학식 83]

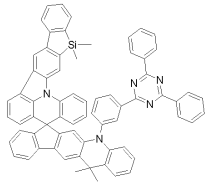


[화학식 84]

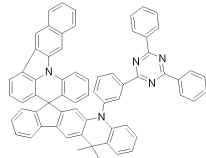


[화학식 85]

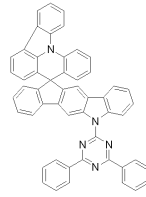
[0091]



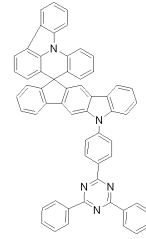
[화학식 86]



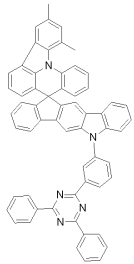
[화학식 87]



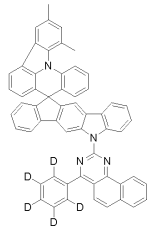
[화학식 88]



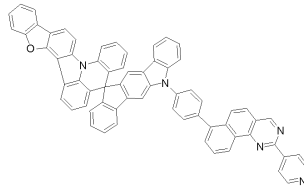
[화학식 89]



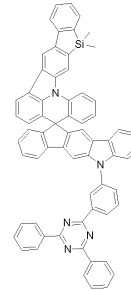
[화학식 90]



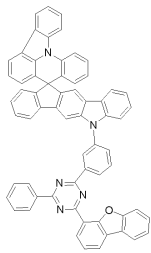
[화학식 91]



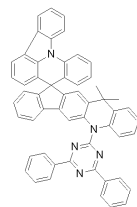
[화학식 92]



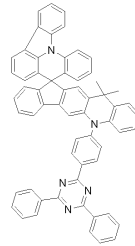
[화학식 93]



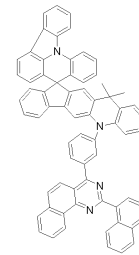
[화학식 94]



[화학식 95]

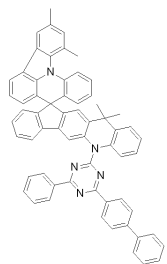


[화학식 96]

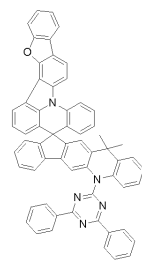


[화학식 97]

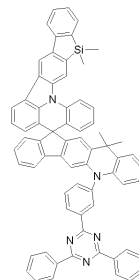
[0092]



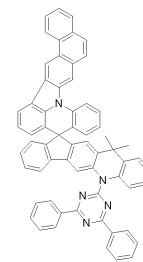
[화학식 98]



[화학식 99]



[화학식 100]



[화학식 101]

[0093]

[0094]

본 발명의 또 다른 측면은 본 발명의 여러 구현예에 따른 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 표시되는 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 유기 박막층에 관한 것이다.

[0095]

본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기 박막층은 하기 [화학식 A-1] 내지 [화학식 J-1]로 표시되는 화합물을 최소한 1개 이상을 더 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0096]

[일반식 A-1]

[0097]

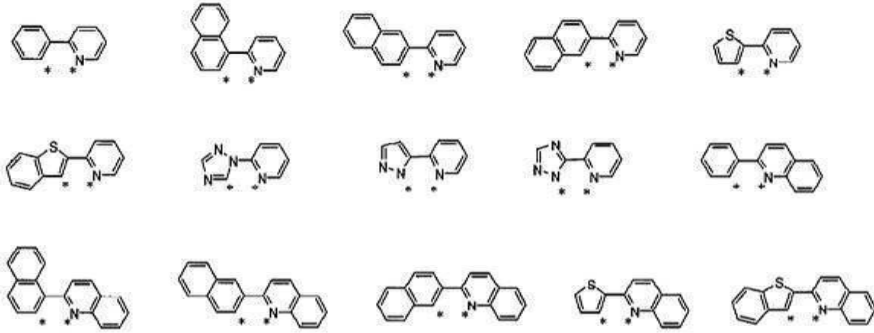
$ML_1L_2L_3$

[0098]

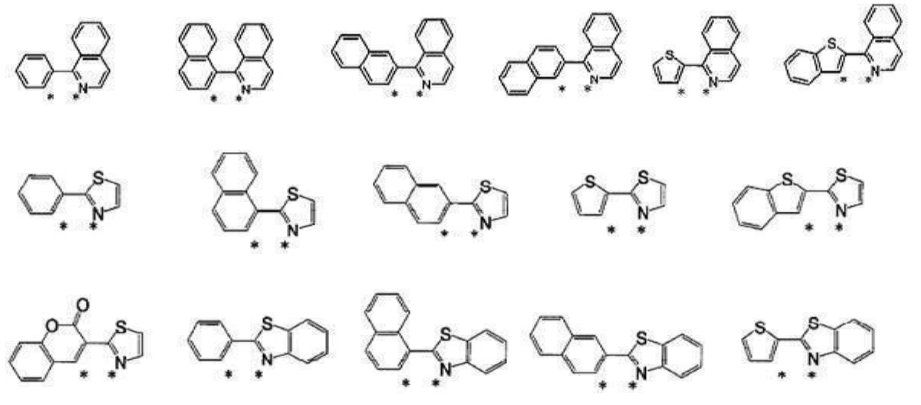
상기 M은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바

람직하게는 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택된다. 또한, 상기 L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub> 및 L<sub>3</sub>은 리간드로 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 하기 [구조식 D]에서 선택되는 어느 하나를 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 하기 [구조식 D]내 \*은 금속 이온 M에 결합하는 사이트(site)를 표현한다.

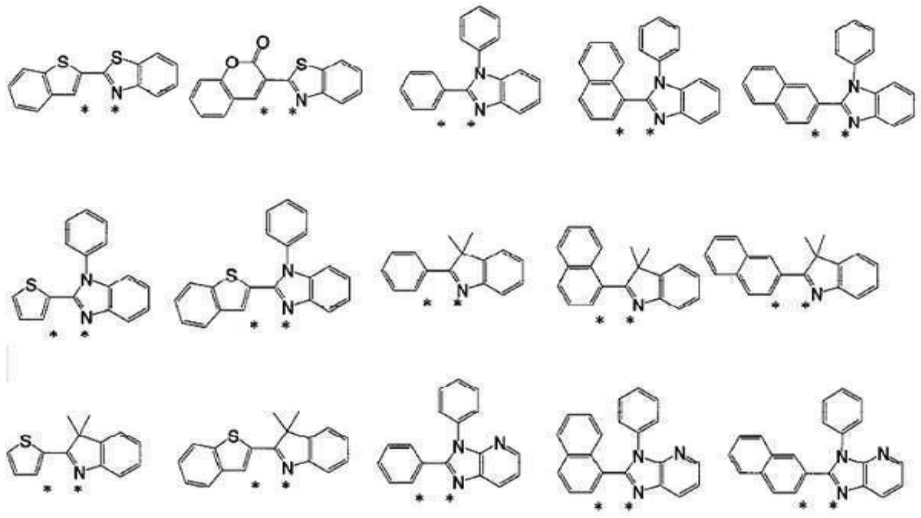
[0099] [구조식 D]



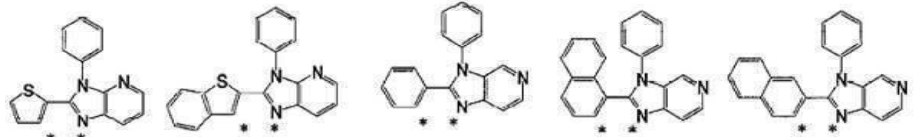
[0100]

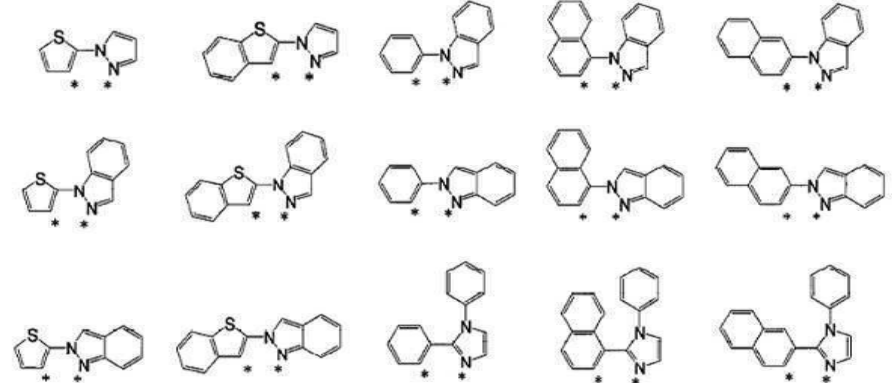
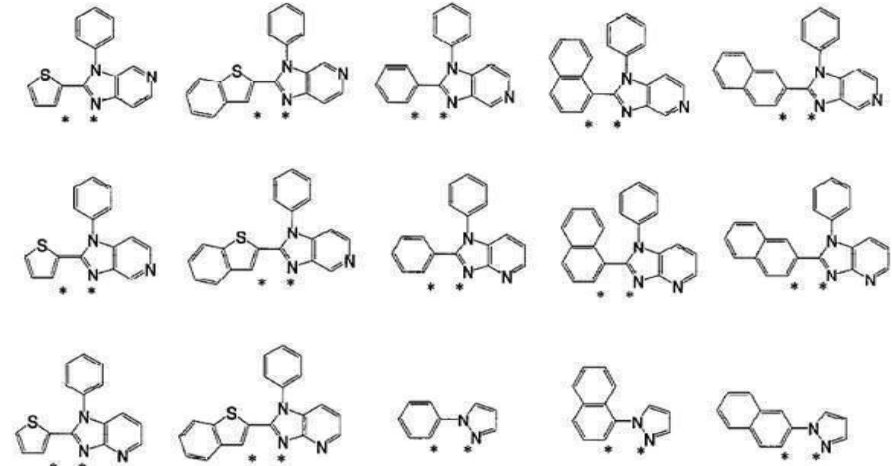
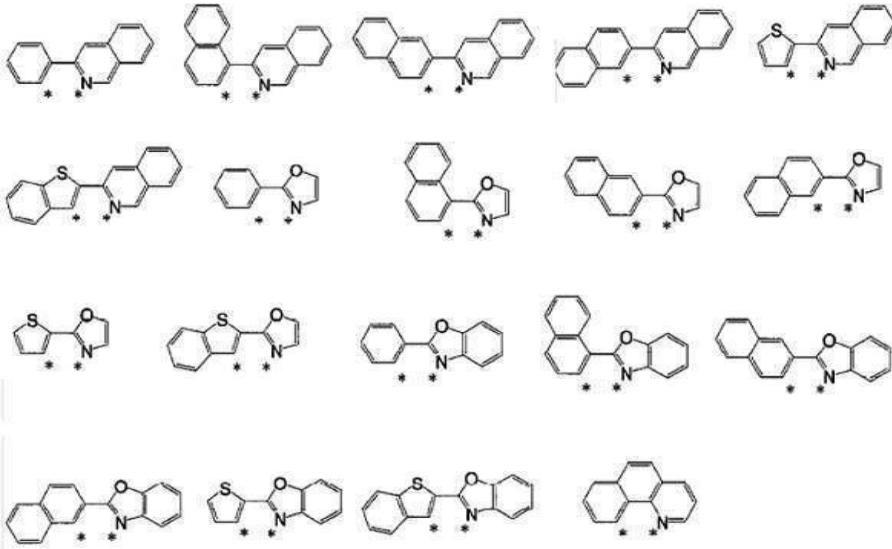


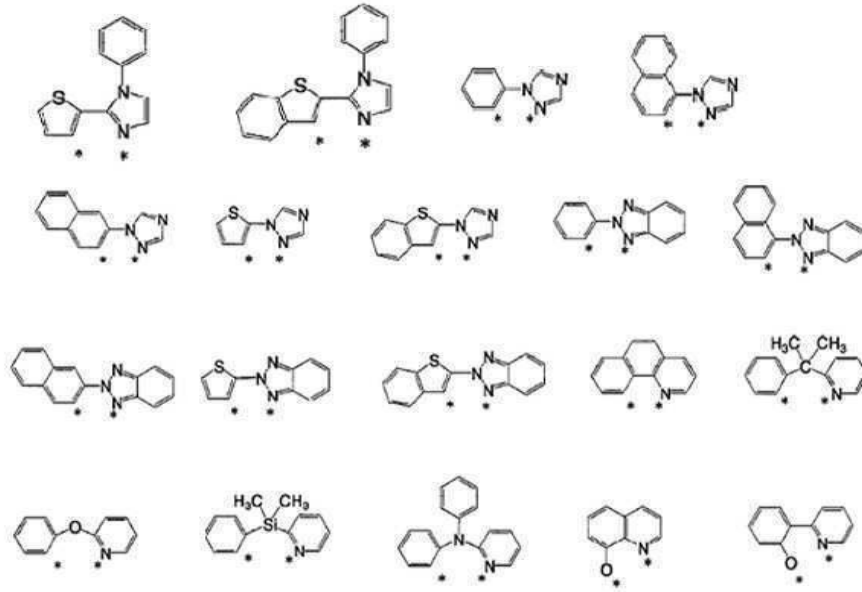
[0101]



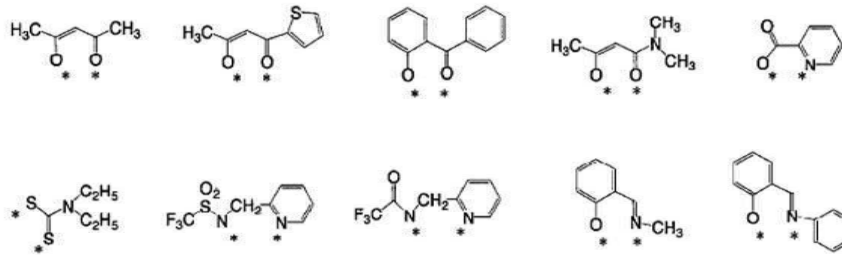
[0102]



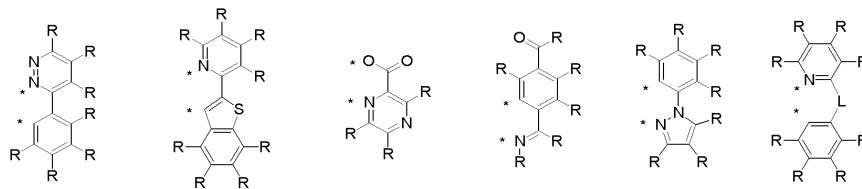
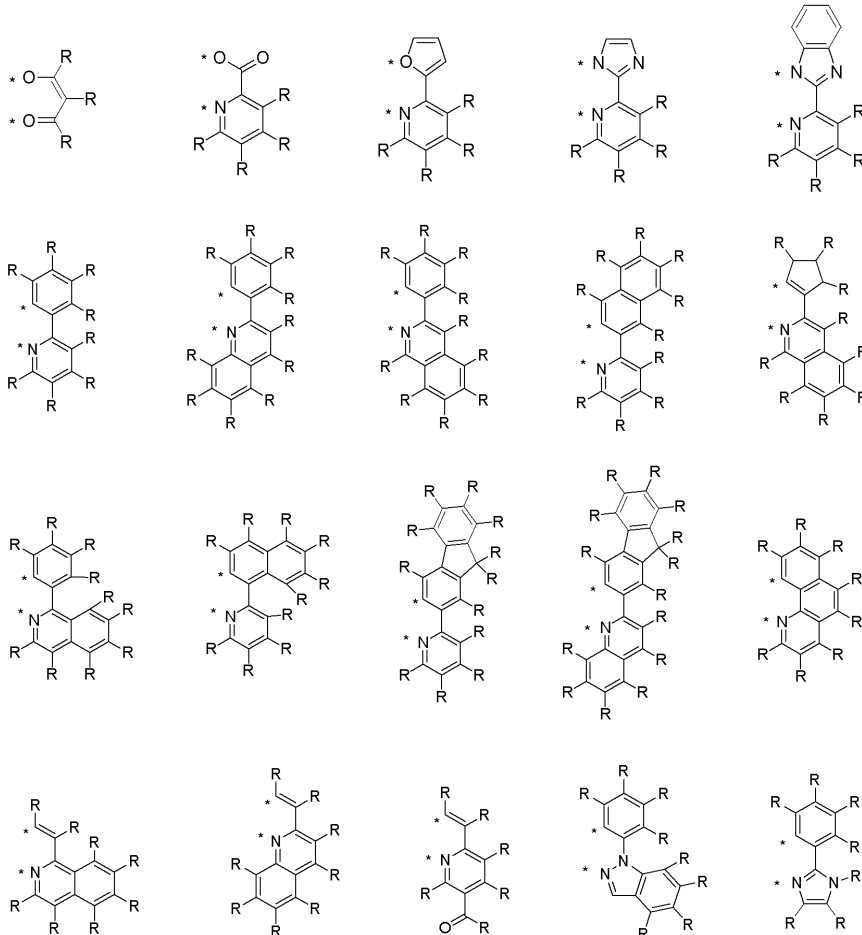




[0106]



[0107]



[0110] 상기 [구조식 D]에서,

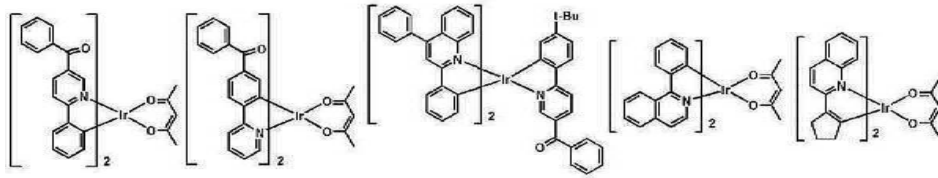
[0111] 상기 R은 서로 상이하거나 동일하며 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0112] 상기 R은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기, 중수소 및 수소 중에서 선택되는 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

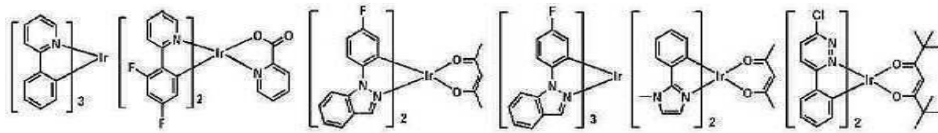
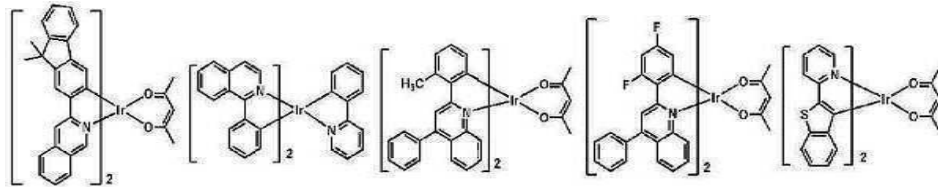
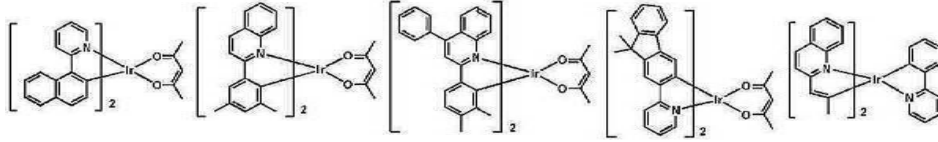
[0113] 또한, 상기 R은 각각의 인접한 치환기와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0114] 상기 L은 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합 고리를 형성할 수 있다.

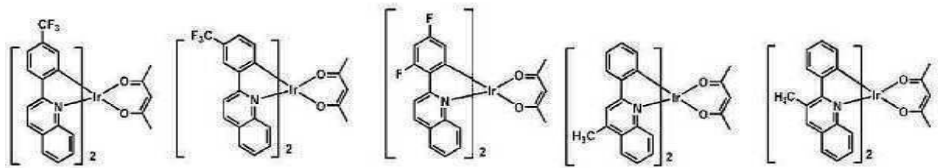
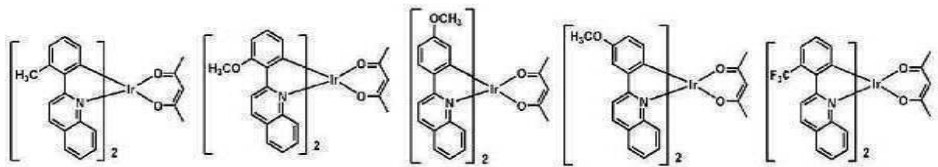
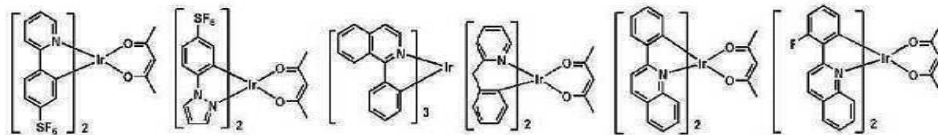
[0115] 구체적인 일 예로서, 상기 [일반식 A-1]으로 표시되는 도펀트는 하기 화합물 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



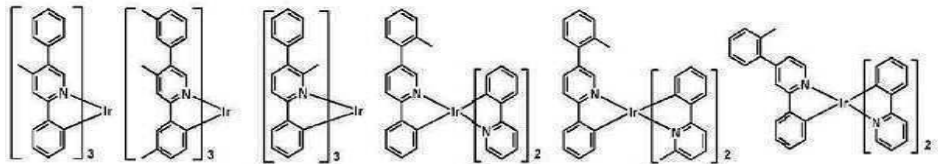
[0116]

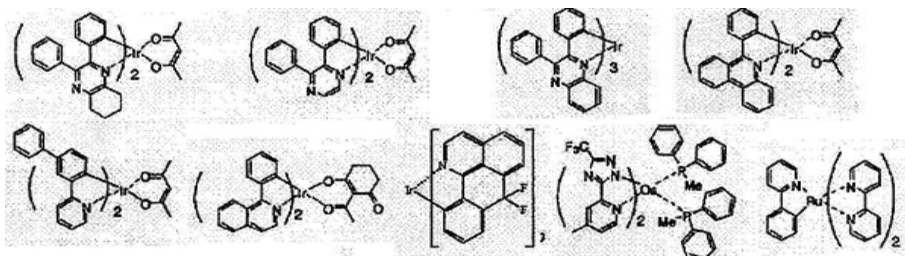
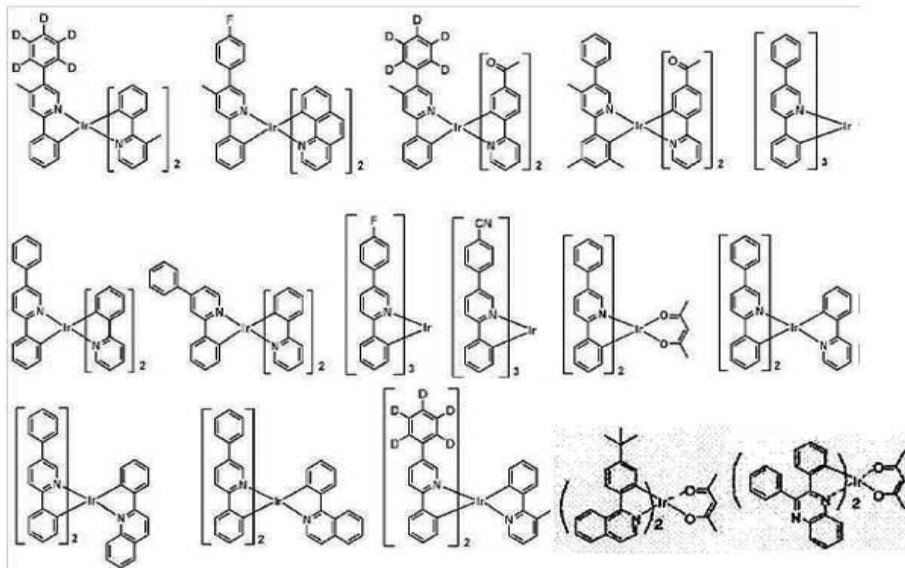
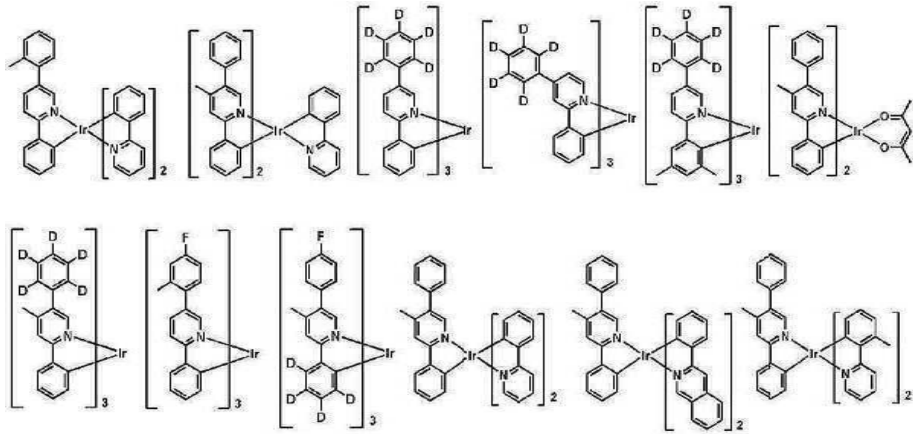


[0117]

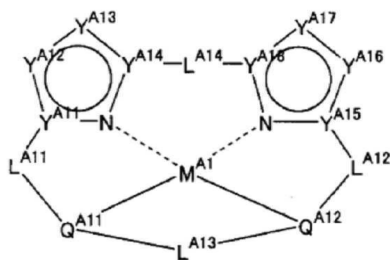


[0118]



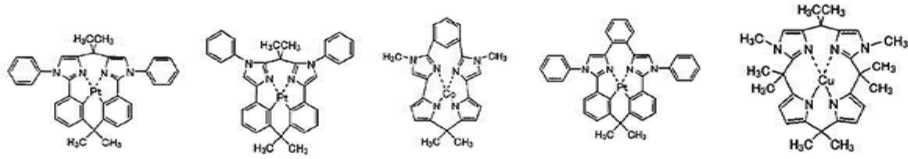


[0122] [일반식 B-1]

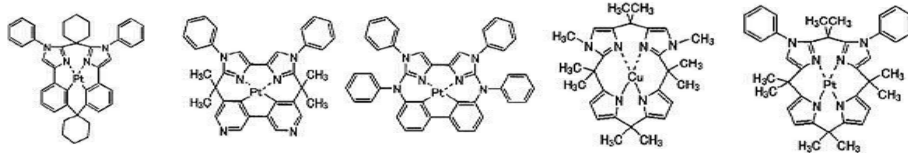


원자, 치환 또는 비치환된 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내고,  $L^{A11}$ ,  $L^{A12}$ ,  $L^{A13}$ ,  $L^{A14}$ 는 각각 앞서 정의한 바와 같은 연결기를 나타내며,  $Q^{A11}$ ,  $Q^{A12}$ 는  $M^{A1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

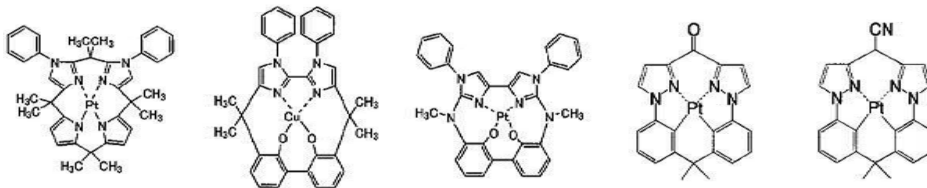
[0126] 상기 [일반식 B-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0127]

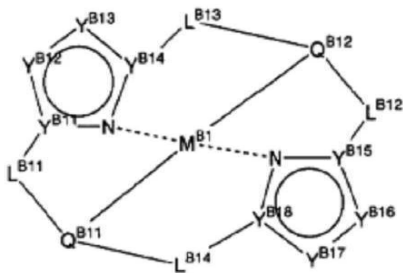


[0128]



[0129]

[일반식 C-1]



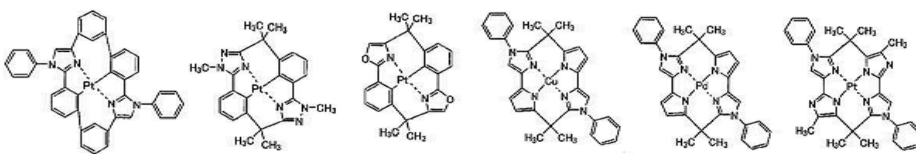
[0131]

상기 [일반식 C-1]에서,

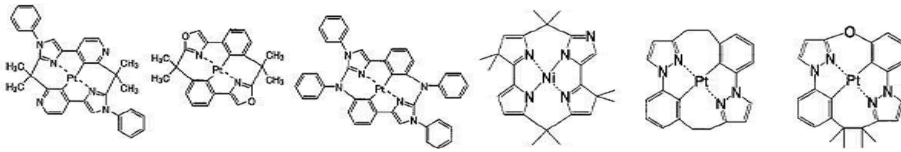
[0132]

$M^{B1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $Y^{B11}$ ,  $Y^{B14}$ ,  $Y^{B15}$  및  $Y^{B18}$ 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고,  $Y^{B12}$ ,  $Y^{B13}$ ,  $Y^{B16}$  및  $Y^{B17}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소 원자, 치환 또는 비치환의 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내며,  $L^{B11}$ ,  $L^{B12}$ ,  $L^{B13}$ ,  $L^{B14}$ 는 연결기를 나타내고,  $Q^{B11}$ ,  $Q^{B12}$ 는  $M^{B1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0134] 상기 [일반식 C-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0135]



[0136]

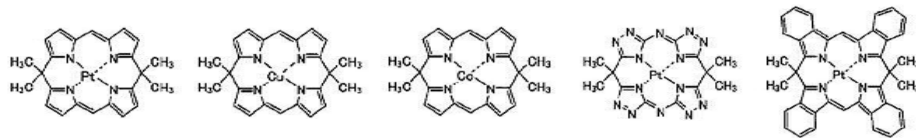
[0137] [일반식 D-1]

[0138]

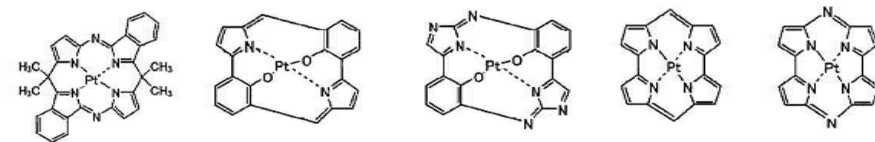
[0139] 상기 [일반식 D-1]에서,

[0140]  $M^{C1}$ 은 금속 이온을 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $R^{C11}$ ,  $R^{C12}$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 없는 치환기를 나타내며,  $R^{C13}$ ,  $R^{C14}$ 는 각각 독립에 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 없는 치환기를 나타내며,  $G^{C11}$ ,  $G^{C12}$ 는 각각 독립에 질소 원자, 치환 또는 비치환의 탄소 원자를 나타내며,  $L^{C11}$ ,  $L^{C12}$ 는 연결기를 나타내며,  $Q^{C11}$ ,  $Q^{C12}$ 는  $M^{C1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0141] 상기 [일반식 D-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.

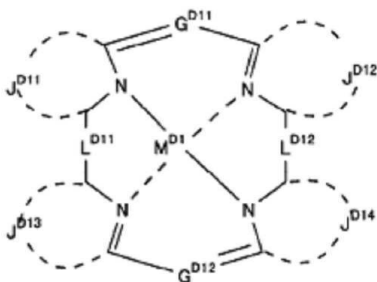


[0142]



[0143]

[0144] [일반식 E-1]



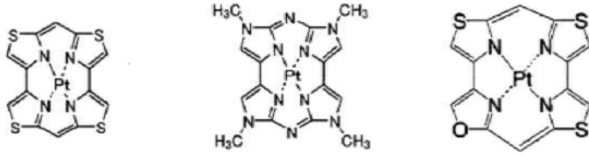
[0145]

[0146] 상기 [일반식 E-1]에서,

[0147]  $M^{D1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $G^{D11}$ ,  $G^{D12}$ 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치

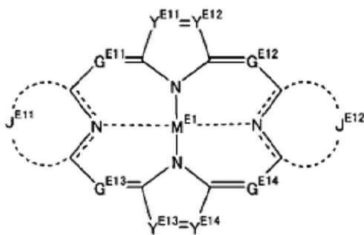
환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며,  $J^{D11}$ ,  $J^{D12}$ ,  $J^{D13}$  및  $J^{D14}$ 는 각각 독립에 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며,  $L^{D11}$ ,  $L^{D12}$ 는 연결기를 나타낸다.

[0148] 상기 [일반식 E-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0149]

[0150] [일반식 F-1]

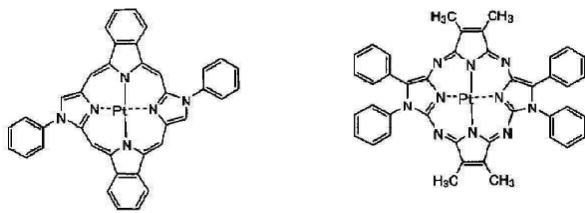


[0151]

[0152] 상기 [일반식 F-1]에서,

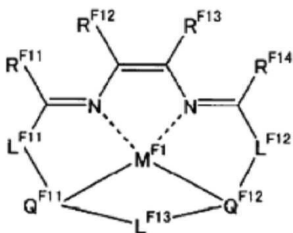
[0153]  $M^{E1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $J^{E11}$ ,  $J^{E12}$ 는 각각 독립적으로 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며,  $G^{E11}$ ,  $G^{E12}$ ,  $G^{E13}$  및  $G^{E14}$ 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며,  $Y^{E11}$ ,  $Y^{E12}$ ,  $Y^{E13}$  및  $Y^{E14}$ 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소원자를 나타낸다.

[0154] 상기 [일반식 F-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0155]

[0156] [일반식 G-1]



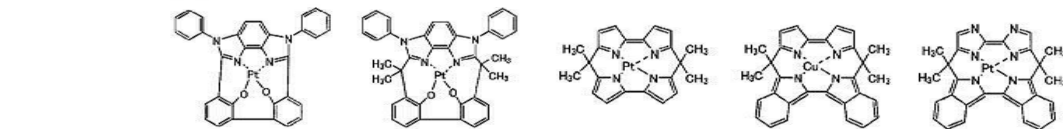
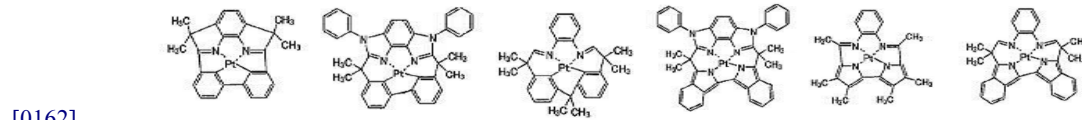
[0157]

[0158] 상기 [일반식 G-1]에서,

[0159]  $M^{F1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타낸다.

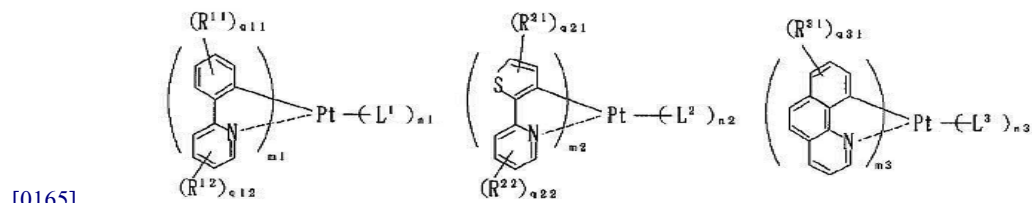
[0160]  $L^{F11}$ ,  $L^{F12}$  및  $L^{F13}$ 은 연결기를 나타내며,  $R^{F11}$ ,  $R^{F12}$ ,  $R^{F13}$  및  $R^{F14}$ 는 치환기를 나타내고,  $R^{F11}$ 과  $R^{F12}$ ,  $R^{F12}$ 와  $R^{F13}$ ,  $R^{F13}$ 과  $R^{F14}$ 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 이때  $R^{F1}$ 과  $R^{F12}$ ,  $R^{F13}$ 과  $R^{F14}$ 가 형성하는 고리는 5 원환이다. 또한  $Q^{F11}$ ,  $Q^{F12}$ 는  $M^{F1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0161] 상기 [일반식 G-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0163]

[0164] [일반식 H-1]                      [일반식 H-2]                      [일반식 H-3]



[0165]

[0166] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]에서,

[0167]  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ 는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴의 치환기이며; 또한 서로 인접한 치환기와 융합고리를 형성할 수 있고,  $q_{11}$ ,  $q_{12}$ 는 0 내지 4의 정수로서, 바람직하게는 0 내지 2가 될 수 있다.

[0168] 또한,  $q_{11}$ ,  $q_{12}$ 가 2 내지 4인 경우, 복수 개의  $R_{11}$  및  $R_{12}$ 는 각각 동일하거나 상이할 수 있다.

[0169]  $L^1$ 은 백금에 결합하는 리간드로서, 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성할수 있는 리간드, 함질소헤테로환 리간드, 디케톤 리간드, 할로겐 리간드가 바람직하고, 보다 바람직하게는 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성하는 리간드, 비피리딜 리간드 또는 페난트로린 리간드이다.

[0170]  $n^1$ 은 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게는 0이고,  $m^1$ 은 1 또는 2이고 바람직하게는 2이다.

[0171] 또한, 상기  $n^1$ ,  $m^1$ 은 상기 일반식 H-1로 나타나는 금속 착체가 중성 착체가 되도록 하는 것이 바람직하다.

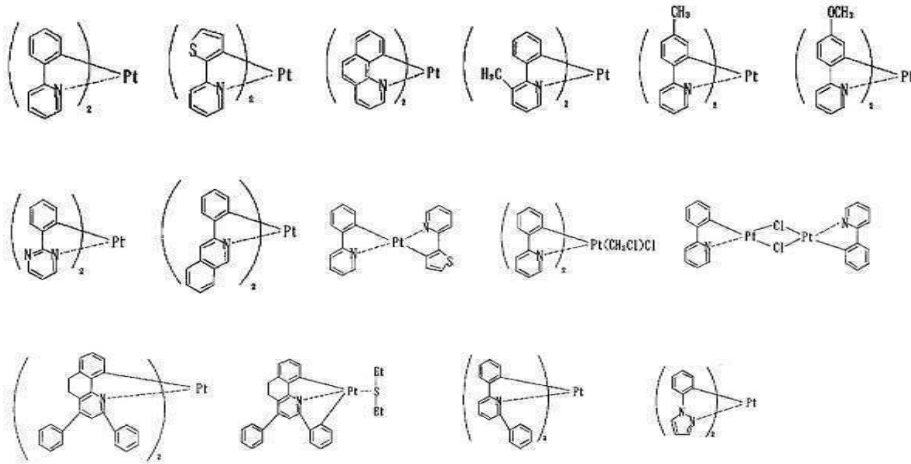
[0172] 상기 [일반식 H-2]에서,

[0173]  $R^{21}$ ,  $R^{22}$ ,  $n^2$ ,  $m^2$ ,  $q^{22}$ ,  $L^2$ 는 각각 상기  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $n^1$ ,  $m^1$ ,  $q^{12}$ ,  $L^1$ 과 동일하고,  $q^{21}$ 은 0 내지 2의 정수이며, 0이 바람직하다.

[0174] 상기 [일반식 H-3]에서,

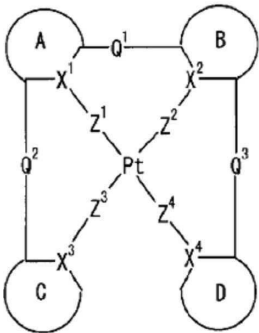
[0175]  $R^{31}$ ,  $n^3$ ,  $m^3$ ,  $L^3$ 은 각각 상기  $R^{11}$ ,  $n^1$ ,  $m^1$ ,  $L^1$ 과 동일하고,  $q^{31}$ 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0 내지 2가 바람직하고, 0이 보다 바람직하다.

[0176] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0177]

[0178] [일반식 I-1]

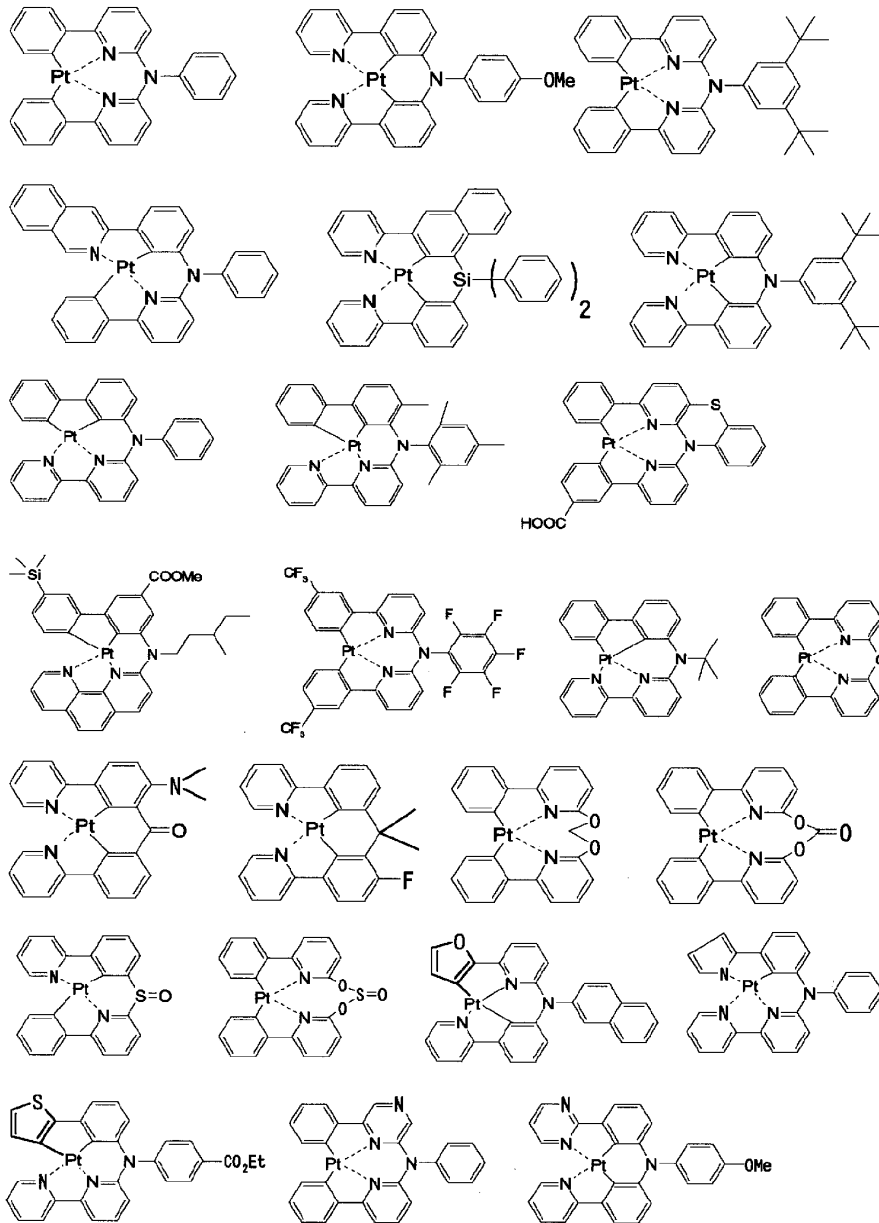


[0179]

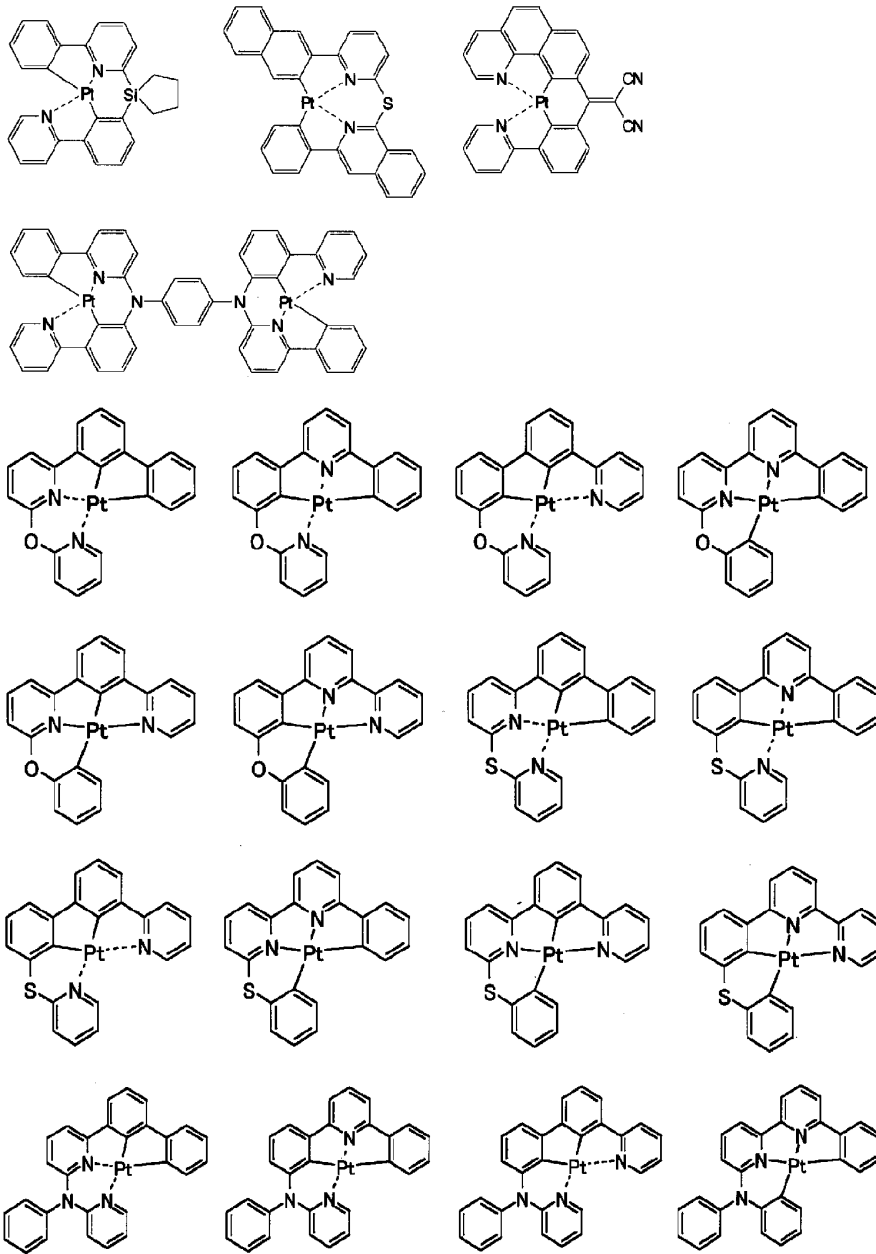
[0180] 상기 [일반식 I-1]에서,

[0181] 고리A, 고리B, 고리C 및 고리D는 상기 고리 A내지 D중의 어느 2개의 고리는 치환기를 가질 수 있는 질소 함유 헤테로고리를 나타내고, 나머지 2개의 환은 고리는 치환기를 가질 수 있는 아릴고리 또는 헤테로아릴고리를 나타내고, 나타내며, 고리A와 고리B, 고리A와 고리C 및/또는 고리B와 고리D로 축합환을 형성할 수 있다.  $X^1, X^2, X^3$  및  $X^4$ 는 이 중의 어느 2개가 백금원자에 배위결합하는 질소원자를 나타내고, 나머지 2개는 탄소원자 또는 질소원자를 나타낸다.  $Q^1, Q^2$  및  $Q^3$ 은 각각 독립적으로 2개의 원자(단) 또는 결합을 나타내지만,  $Q^1, Q^2$  및  $Q^3$ 이 동시에 결합을 나타내지는 않는다.  $Z^1, Z^2, Z^3$  및  $Z^4$ 는 어느 2개가 배위결합을 나타내고, 나머지 2개는 공유결합, 산소원자 또는 황원자를 나타낸다.

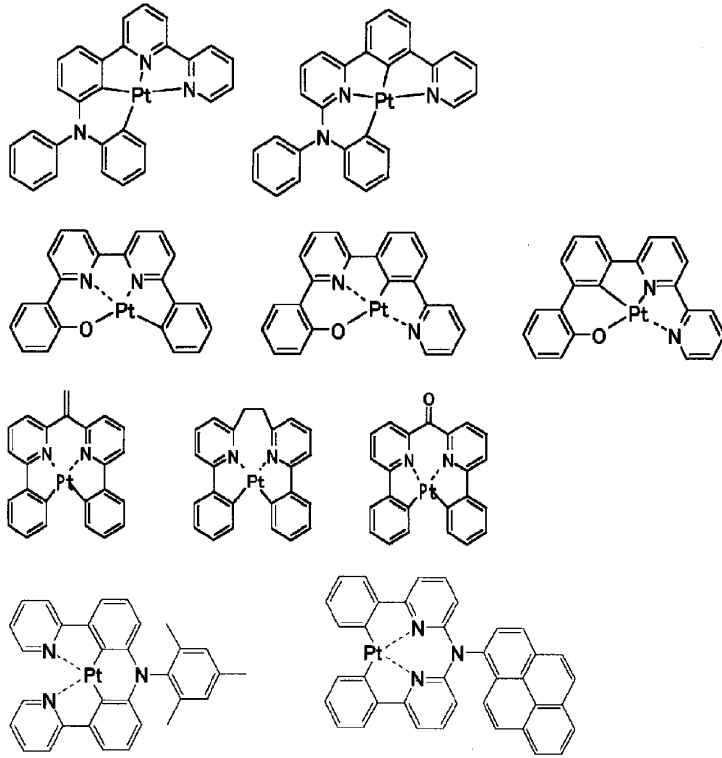
[0182] 상기 [일반식 I-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0183]



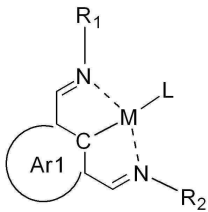
[0184]



[0185]

[0186]

[일반식 J-1]



[0187]

[0188]

상기 [일반식 J-1]에 있어서,

[0189]

M은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Ar1은 치환 또는 비치환의 고리구조를 표현하고, 상기 M에 결합하는 2개의 아조메틴(azomethine) 결합(-C=N-)에 있어서, 질소원자(N)는 각각 상기 M에 결합하고, 전체로서 상기 M에 3좌에서 결합되는 3좌 배위자를 형성하고 있다.

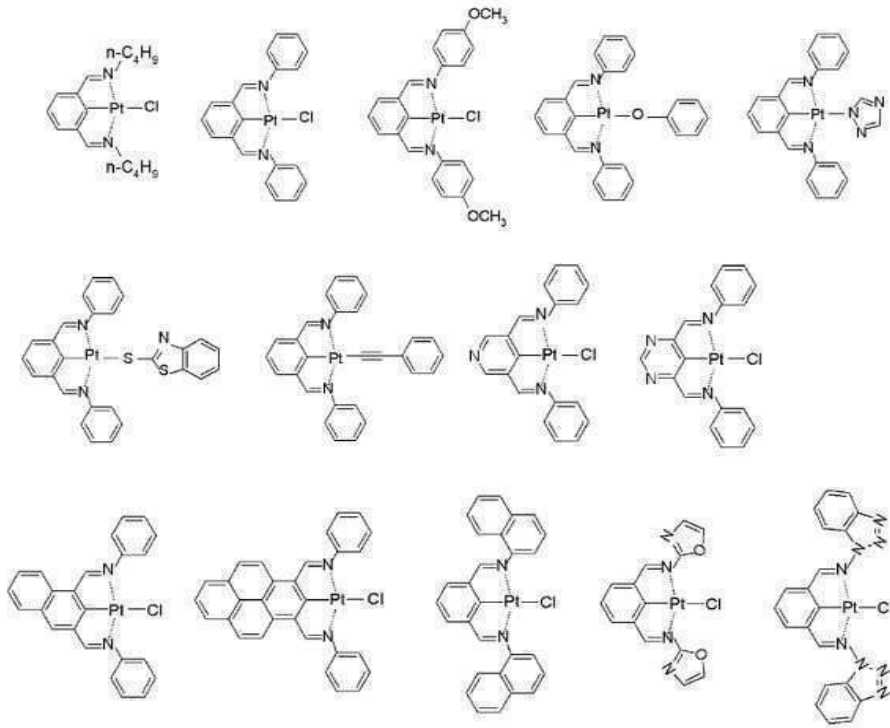
[0190]

또한, Ar1에 있어서 C는 Ar1으로 표시되는 고리구조를 구성하는 탄소원자를 나타낸다. 또한 상기 R1 및 R2는, 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 각각 치환 또는 비치환의 알킬기 또는 아릴기를 나타내며, L은 1좌 배위자를 표현한다.

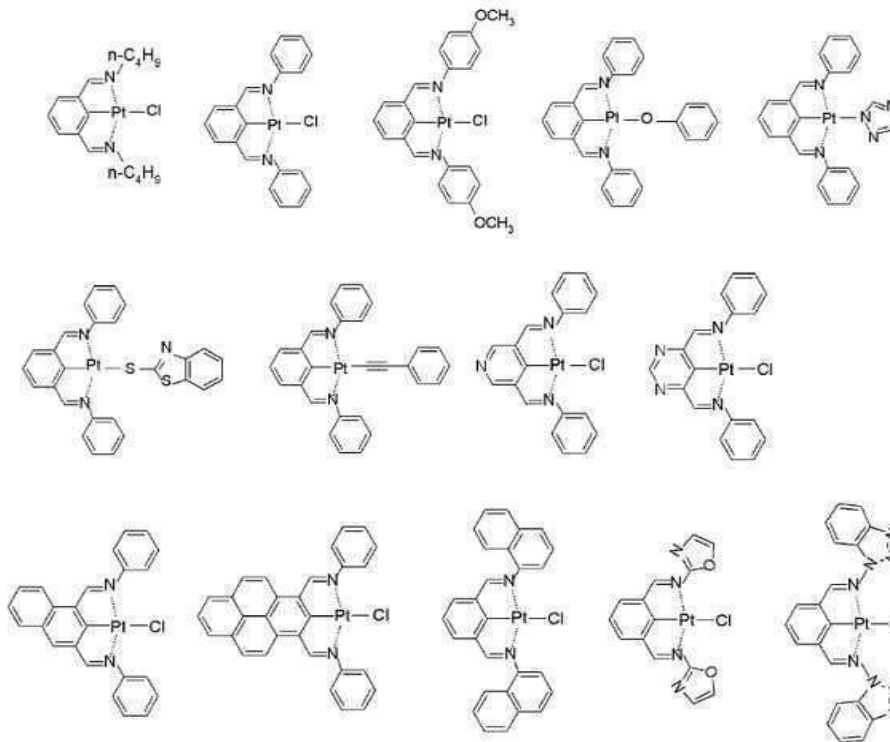
[0191]

상기 [일반식J-1]에 있어서, 상기 M은 Pt인 것이 바람직하다. 또한, 상기 Ar1으로서는, 5원환, 6원환 및 이들의 축합환기부터 선택되는 것이 바람직하다.

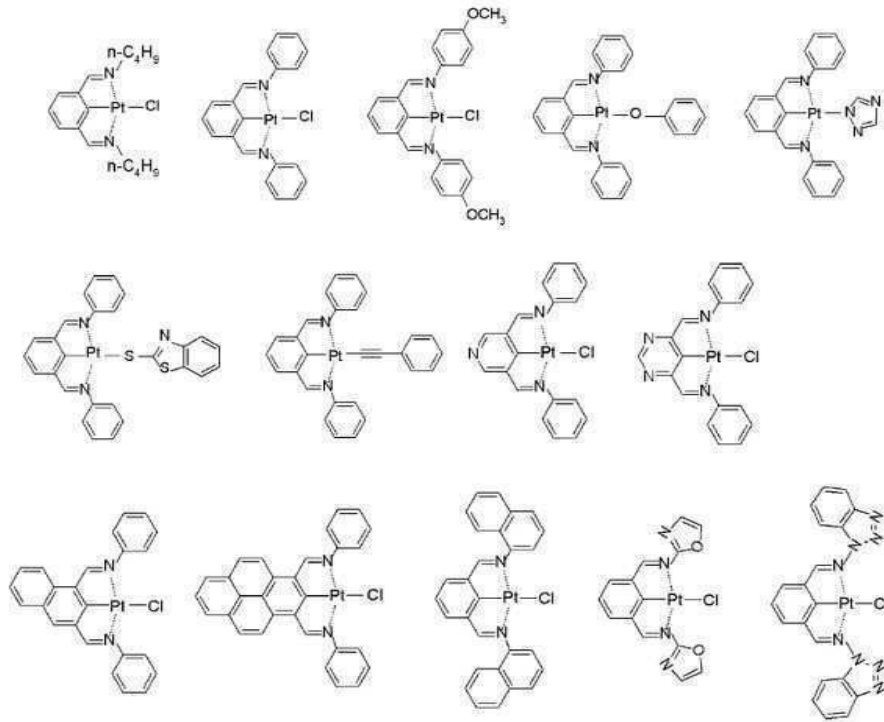
[0192] 상기 [일반식 J-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0193]



[0194]



[0195]

[0196]

또한, 상기 유기 박막층은 본 발명에 따른 유기전계발광 화합물과 상기 도판트 화합물 이외에도 다양한 호스트 화합물과 다양한 도판트 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0197]

본 발명의 또 다른 측면은 제1 전극, 제2 전극 및 제1 전극과 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 상기 유기 박막층은 상기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-2]로 구현되는 유기전계발광 화합물을 포함한다.

[0198]

또한, 상기 본 발명의 유기발광 화합물이 포함된 유기 박막층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택된 하나 이상을 더 포함할 수 있다.

[0199]

이때, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기 박막층은 발광층을 포함할 수 있으며, 상기 발광층은 호스트와 도판트로 이루어지고, 본 발명에 따른 유기전계발광 화합물은 호스트로서 사용될 수 있다.

[0200]

한편, 상기 발광층에는 호스트와 더불어 도판트 재료가 사용될 수 있다. 상기 발광층이 호스트 및 도판트를 포함할 경우, 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다.

[0201]

본 발명의 일 실시예에 의하면, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자 및 단색 또는 백색 조명용 소자에 사용될 수 있다.

[0202]

본 발명의 유기전계발광소자는 필요에 따라서 추가로 공지된 유기전계발광소자용 재료를 첨가할 수도 있다. 예를 들면, 비스아릴아미노 구조 또는 N-아릴카르바졸릴 구조를 갖는 정공을 수송하는 화합물이나 벤조이미다졸릴 구조를 갖는 전자를 수송하는 화합물을 첨가할 수도 있다. 구체적으로 후술하는 정공 주입, 정공수송층을 형성하는 재료나 전자 주입 재료를 사용할 수 있다.

[0203]

본 발명의 유기전계발광소자는 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 포함하는 1 이상의 유기 박막층이 협지되어 있다. 그리고, 유기 박막층의 적어도 한층이 본 발명에 따른 유기전계발광 화합물을 단독 또는 혼합물의 성분으로서 함유한다.

- [0204] 본 발명에 따른 유기전계 발광 화합물은 발광층 외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층에 이용할 수도 있다. 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 유기 박막층이 복수층형으로 구성된 유기전계발광소자로서, 구체적으로 (양극/정공 주입층/발광층/음극), (양극/발광층/전자 주입층/음극), (양극/정공 주입층/발광층/전자 주입층/음극), (양극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 주입층/음극) 등의 구성으로 적층한 것을 들 수 있다.
- [0205] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 유기 박막층을 복수층 구조로 함으로써, 켈칭에 의한 휘도나 수명의 저하를 막을 수 있다. 또한 필요에 따라서는 발광 재료, 도핑 재료, 정공 주입 재료나 전자 주입 재료를 조합하여 사용할 수 있다. 또한, 도핑 재료에 의해, 발광 휘도나 발광 효율이 향상되는 경우가 있다. 또한, 정공 주입층, 발광층, 전자 주입층은 각각 2층 이상의 층 구성에 의해 형성될 수도 있다. 그 때에는, 정공 주입층의 경우, 전극으로부터 정공을 주입하는 층을 정공 주입층, 정공 주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층을 정공 수송층이라고 부른다. 마찬가지로, 전자 주입층의 경우, 전극으로부터 전자를 주입하는 층을 전자 주입층, 전자 주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층을 전자 수송층이라고 부른다. 이들 각 층은 재료의 에너지 준위, 내열성, 유기층 또는 금속 전극과의 밀착성 등의 각 요인에 따라 선택되어 사용된다.
- [0206] 정공 주입 재료로서는, 정공을 수송하는 능력을 갖고, 양극으로부터의 정공 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 또한 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로 프탈로시아닌 유도체, 나프탈로시아닌 유도체, 포르피린 유도체, 벤지딘형 트리페닐아민, 디아민형 트리페닐아민, 헥사시아노헥사아자트리페닐렌 등과, 이들의 유도체, 및 폴리비닐카르바졸, 폴리실란, 도전성 고분자 등의 고분자 재료를 들 수 있지만, 이들에 한정되는 것은 아니다.
- [0207] 본 발명의 유기전계발광소자에서 사용할 수 있는 정공 주입 재료 중에서 더욱 효과적인 정공 주입 재료는 프탈로시아닌 유도체이다. 프탈로시아닌(Pc) 유도체로서는, 예를 들면 H2Pc, CuPc, CoPc, NiPc, ZnPc, PdPc, FePc, MnPc, ClAlPc, ClGaPc, ClInPc, ClSnPc, Cl2SiPc, (HO)AlPc, (HO)GaPc, VOPc, TiOPc, MoOPc, GaPc-O-GaPc 등의 프탈로시아닌 유도체 및 나프탈로시아닌 유도체가 있지만, 이것에 한정되는 것은 아니다.
- [0208] 또한, 정공 주입 재료에 TCNQ 유도체 등의 전자 수용 물질을 첨가함으로써 캐리어를 증감시킬 수도 있다. 본 발명의 유기 EL 소자에서 사용할 수 있는 바람직한 정공 수송 재료는 방향족 3급 아민 유도체이다. 방향족 3급 아민 유도체로서는, 예를 들면 N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-1,1'-비페닐-4,4'-디아민, N,N,N',N'-테트라비페닐-1,1'-비페닐-4,4'-디아민 등, 또는 이들 방향족 삼급 아민 골격을 가진 올리고머 또는 중합체이나, 이것에 한정되는 것은 아니다.
- [0209] 전자 주입 재료로서는 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자 주입 효과를 갖고, 또한 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 본 발명의 유기 EL 소자에 있어서, 더욱 효과적인 전자 주입 재료는 금속 착체 화합물 및 질소 함유 복소환 유도체이다.
- [0210] 상기 금속 착체 화합물로서는, 예를 들면 8-히드록시퀴놀리네이트리튬, 비스(8-히드록시퀴놀리네이트)아연, 트리스(8-히드록시퀴놀리네이트)알루미늄, 트리스(8-히드록시퀴놀리네이트)갈륨, 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리네이트)베릴륨, 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리네이트)아연 등을 들 수 있지만, 이것에 한정되는 것은 아니다.
- [0211] 상기 질소 함유 복소환 유도체로서는, 예를 들면 옥사졸, 티아졸, 옥사디아졸, 티아디아졸, 트리아졸, 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 페난트롤린, 벤즈이미다졸, 이미다조피리딘 등이 바람직하고, 그 중에서도 벤즈이미다졸 유도체, 페난트롤린 유도체, 이미다조피리딘 유도체가 바람직하다.
- [0212] 바람직한 구현예로서, 이들 전자 주입 재료에 추가로 도펀트를 함유하고, 음극으로부터의 전자의 수취를 쉽게 하기 위해서 보다 바람직하게는 제2 유기층의 음극계면 근방에 알칼리 금속으로 대표되는 도펀트를 도핑한다. 도펀트로서는, 전자주계성 금속, 전자주계성 금속 화합물 및 전자주계성 금속 착체를 들 수 있고, 이들 환원성 도펀트는 1종을 단독으로 사용할 수도 있고, 2종 이상을 조합하여 사용할 수도 있다.
- [0213] 본 발명의 유기전계발광소자에 있어서는, 발광층 중에 유기전계발광 화합물로부터 선택되는 적어도 1종 외에, 발광 재료, 도핑 재료, 정공 주입 재료, 정공 수송 재료 및 전자 주입 재료의 적어도 1종이 동일층에 함유될 수도 있다. 또한, 본 발명에 의해 얻어진 유기전계발광소자의, 온도, 습도, 분위기 등에 대한 안정성의 향상을 위해 소자의 표면에 보호층을 설치하거나, 실리콘 오일, 수지 등에 의해 소자 전체를 보호하는 것도 가능하다.
- [0214] 본 발명의 유기전계발광소자의 양극에 사용되는 도전성 재료로서는, 4 eV 보다 큰 일함수를 갖는 것이

적합하고, 탄소, 알루미늄, 바나듐, 철, 코발트, 니켈, 텅스텐, 은, 금, 백금, 팔라듐 등 및 이들의 합금, ITO 기판, NESA 기판에 사용되는 산화주석, 산화인듐 등의 산화 금속, 나아가서는 폴리티오펜이나 폴리피롤 등의 유기 도전성 수지가 이용된다. 음극에 사용되는 도전성 물질로서는, 4 eV 보다 작은 일함수를 갖는 것이 적합하고, 마그네슘, 칼슘, 주석, 납, 티타늄, 이트륨, 리튬, 루테튬, 망간, 알루미늄, 불화리튬 등 및 이들의 합금이 이용되지만, 이것에 한정되는 것은 아니다. 합금으로서, 마그네슘/은, 마그네슘/인듐, 리튬/알루미늄 등을 대표예로서 들 수 있지만, 이들에 한정되는 것은 아니다. 합금의 비율은 증착원의 온도, 분위기, 진공도 등에 따라 제어되고, 적절한 비율로 선택된다. 양극 및 음극은, 필요가 있으면 2층 이상의 층 구성에 의해 형성될 수도 있다.

[0215] 본 발명의 유기전계발광소자에서는, 효율 좋게 발광시키기 위해서, 적어도 한쪽면은 소자의 발광 파장 영역에서 충분히 투명하게 하는 것이 바람직하다. 또한, 기판도 투명한 것이 바람직하다. 투명 전극은 상기한 도전성 재료를 사용하여, 증착이나 스퍼터링 등의 방법으로 소정의 투광성이 확보되도록 설정한다. 발광면의 전극은 광투과율을 10% 이상으로 하는 것이 바람직하다. 기판은 기계적, 열적 강도를 갖고, 투명성을 갖는 것이면 한정되는 것은 아니지만, 유리 기판 및 투명성 수지 필름이 있다.

[0216] 본 발명의 유기전계발광소자의 각 층의 형성은, 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나 스핀 코팅, 디핑, 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 방법을 적용할 수도 있다. 막 두께는 특별히 한정되는 것은 아니지만, 적절한 막 두께로 설정할 필요가 있다. 막 두께가 너무 두꺼우면 일정한 광 출력을 얻기 위해서 큰 인가 전압이 필요하게 되어 효율이 나빠진다. 막 두께가 너무 얇으면 핀홀 등이 발생하여, 전계를 인가하더라도 충분한 발광 휘도가 얻어지지 않는다. 통상의 막 두께는 5 nm 내지 10 μm의 범위가 적합한데, 10 nm 내지 0.2 μm의 범위가 더욱 바람직하다.

[0217] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를, 에탄올, 클로로포름, 테트라히드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 어느 것이어도 된다. 이러한 습식 성막법에 적합한 용액으로서, 유기전계발광 재료로서 본 발명의 방향족 아민 유도체와 용매를 함유하는 유기전계발광 재료 함유 용액을 사용할 수 있다.

[0218] 본 발명의 유기전계발광소자는 벽걸이 텔레비전의 평판 디스플레이 등의 평면 발광체, 복사기, 프린터, 액정 디스플레이의 백라이트 또는 계기류 등의 광원, 표시판, 표시등 등에 이용할 수 있다. 또한, 본 발명의 화합물은 유기전계발광소자뿐만 아니라, 전자 사진 감광체, 광전 변환 소자, 태양 전지, 이미지 센서 등의 분야에서도 사용할 수 있다.

[0219] 또한, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자가 출원 시의 상식 및 본 발명의 개시 내용에 기초한다면 본 발명의 특허청구범위에 기재된 화합물을 과도한 시행착오 또는 고도의 실험 없이 용이하게 제조하고 활용할 수 있을 것이라는 점은 자명하다.

[0220] 즉, 하기 실시예에는 모두 기재하지는 않았지만, 본 발명자의 실험 결과에 따르면, 하기 실시예에 기재된 화합물과 하기 실시예에 기재되지 않은 화합물 간에 치환기의 크기, 배향성, 입체장애 가능성, 극성 차이 등이 일견 있을 수 있다고 보이는 경우라고 하더라도, 하기 실시예에 기재된 구체적인 제조공정이 그리 복잡하지도 않을 뿐만 아니라 복잡한 부반응이 수반되지도 않아, 본 발명의 기술분야의 통상의 기술자라면 출원 시의 기술상식에 기초하여 하기 실시예의 구체적인 제조방법에 대한 기재만에 의해서 본 발명의 특허청구범위에 기재된 화합물을 특수한 지식을 부가하지 않고서도 제조할 수 있다는 점은 자명하다.

[0221] 이하에서 본 발명을 실시예에 의해 더욱 구체적으로 설명한다. 다만 하기 실시예는 예시로서 제시될 뿐, 본 발명은 이에 의해서 어떠한 한정도 되지 않는다.

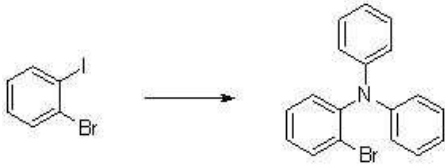
[0222] **실시예**

[0223] <실시예 1> [화학식 2]로 표시되는 화합물의 합성

[0224] (1) [화학식 1-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0225] 하기 [반응식 1]에 의하여 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0226] [반응식 1]



[0227]

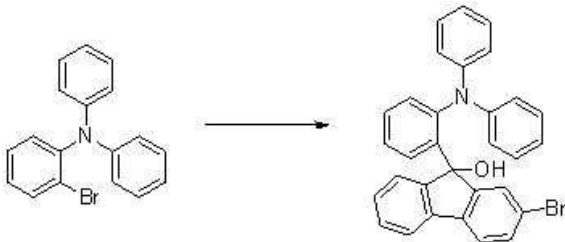
[0228] [화학식 1-a]

[0229] 디페닐아민 70.0 g (413.7 mmol), 2-브로모아이오도벤젠 140.4 g (496.3 mmol), 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐 7.6 g (8.3 mmol), 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센 5.2 g (8.4 mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 159.0 g (1654.4 mmol)과 톨루엔 800 ml를 투입 후 24시간 환류, 교반하였다. 반응이 종료되면 필터 후 용액을 농축하고 헥산 단독으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하고 헥산으로 재결정하여 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물 45.4 g을 얻었다. (수율 34%)

[0230] (2) [화학식 1-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0231] 하기 [반응식 2]에 의하여 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0232] [반응식 2]



[0233]

[0234] [화학식 1-a]

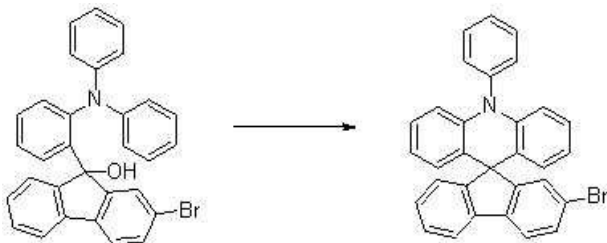
[화학식 1-b]

[0235] 상기 [반응식 1]로부터 얻은 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물 45.4 g (140.0 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 400 ml에 녹인 후 -78 °C에서 교반하면서 1.6M 노르말-부틸리튬84.4 ml (135.0 mmol)를 천천히 적가하고 -78 °C를 유지하면서 1시간 동안 교반시킨다. 그 후 2-브로모플루오렌 25.0 g (96.5 mmol)을 천천히 적가한 후 상온으로 올린다. 반응이 종료되면 물을 넣은 후 유기층을 분리하여 농축시킨 후 메틸렌클로라이드와 헥산을 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물 43.0 g을 얻었다. (수율 89%)

[0236] (3) [화학식 1-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0237] 하기 [반응식 3]에 의하여 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0238] [반응식 3]



[0239]

[0240] [화학식 1-b]

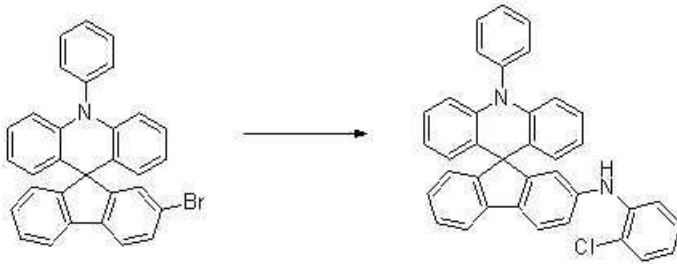
[화학식 1-c]

[0241] 상기 [반응식 2]로부터 얻은 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물 43.0 g (85.3 mmol)을 아세트산 400 ml에 녹인 후 진한 염산 한 방울을 투입 후 2시간 환류, 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 메탄올로 씻어주면서 여과한다. 메틸렌클로라이드와 메탄올로 재결정하여 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 23.0 g을 얻었다. (수율 55%)

[0242] (4) [화학식 1-d]로 표시되는 화합물의 합성

[0243] 하기 [반응식 4]에 의하여 [화학식 1-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0244] [반응식 4]



[0245]

[0246] [화학식 1-c]

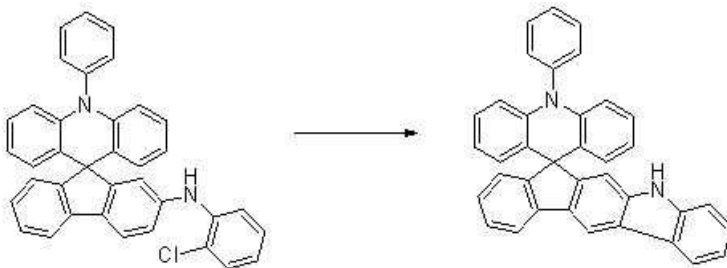
[화학식 1-d]

[0247] 상기 [반응식 3]으로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 23.0 g (47.3 mmol), 2-클로로아닐린 6.0 g (47.3 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 0.9 g (1.0 mmol), 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센 0.6 g (1.0 mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 9.1 g (94.7 mmol)과 톨루엔 230 ml를 투입 후 24시간 환류, 교반하였다. 반응이 종료되면 필터 후 용액을 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 그리고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 1-d]로 표시되는 화합물 11.6 g을 얻었다. (수율 46%)

[0248] (5) [화학식 1-e]로 표시되는 화합물의 합성

[0249] 하기 [반응식 5]에 의하여 [화학식 1-e]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0250] [반응식 5]



[0251]

[0252] [화학식 1-d]

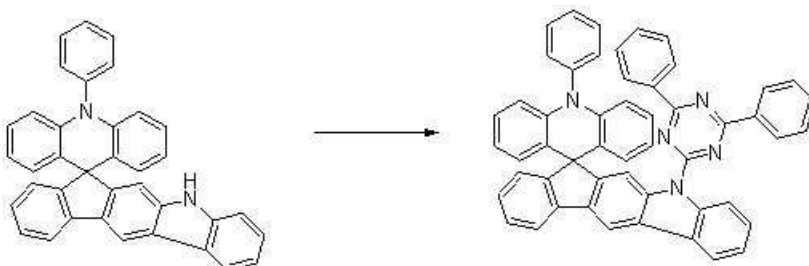
[화학식 1-e]

[0253] 상기 [반응식 4]로부터 얻은 [화학식 1-d] 화합물 11.6 g (21.8 mmol), 팔라듐 아세테이트 0.48 g (2.2 mmol), 트리아시클로헥실포스핀 테트라플루오르보레이트 1.60 g (4.4 mmol), 소듐 카보네이트 13.84 g (130.6 mmol)과 디메틸포름아마이드 174 ml를 투입 후 12시간 환류, 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 물을 넣은 후 생성된 결정을 여과하여 얻은 후 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 그리고 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 1-e]로 표시되는 화합물 1.2 g을 얻었다. (수율 11%)

[0254] (6) [화학식 2]로 표시되는 화합물의 합성

[0255] 하기 [반응식 6]에 의하여 [화학식 2]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0256] [반응식 6]



[0257]

[0258] [화학식 1-e] [화학식 2]

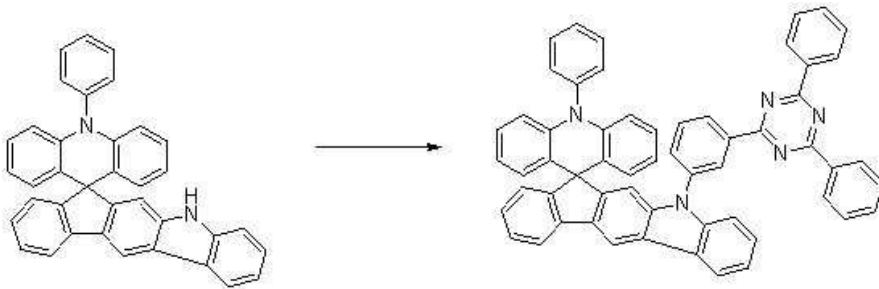
[0259] 상기 [반응식 5]로부터 얻은 [화학식 1-e] 화합물 1.2 g (2.4 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 0.11 g (2.88 mmol)을 디메틸포름아마이드 24 ml에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 클로로디페닐트리아진 0.77 g (2.88 mmol)을 디메틸포름아마이드 24 ml에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다.

[0260] 반응이 종료되면 증류수 20 ml를 첨가해주고 여과 후 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 2]로 표시되는 화합물 1.08 g을 얻었다. (수율 62%)

[0261] <실시예 2> [화학식 3]으로 표시되는 화합물의 합성

[0262] 하기 [반응식 7]에 의하여 [화학식 3]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0263] [반응식 7]



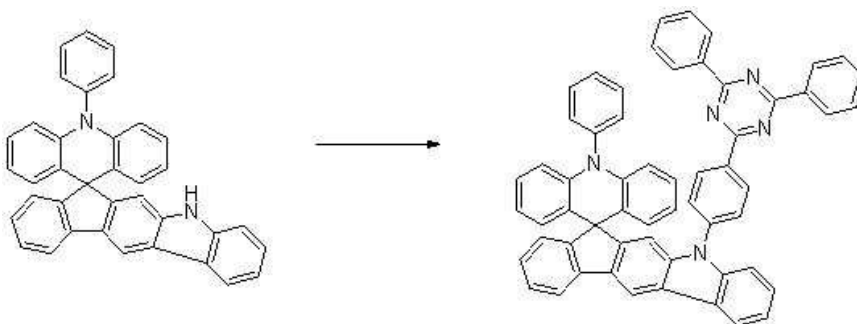
[0264] [화학식 1-e] [화학식 3]

[0265] <실시예 1>의 (5)로부터 얻은 [화학식 1-e] 화합물 1.2 g (2.4 mmol), 2-(3-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 0.89 g (2.28 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 0.046 g (0.05 mmol), 트리스(터셔리-부틸 포스핀) 0.01 g (0.05 mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 0.46 g (4.8 mmol)과 톨루엔 30 ml를 투입 후 24시간 환류, 교반하였다. 반응이 종료되면 필터 후 용액을 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 그리고 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 3]로 표시되는 화합물 1.32 g을 얻었다. (수율 72%)

[0267] <실시예 3> [화학식 4]로 표시되는 화합물의 합성

[0268] 하기 [반응식 8]에 의하여 [화학식 4]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0269] [반응식 8]



[0270] [화학식 1-e] [화학식 4]

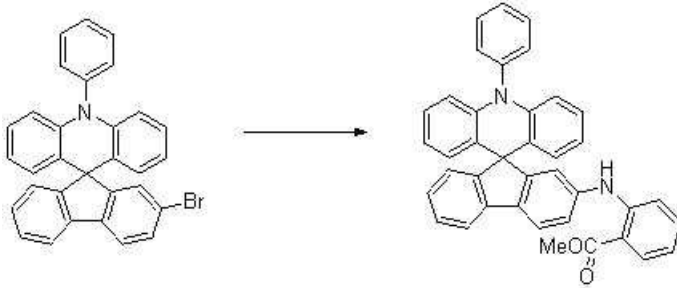
[0272] <실시예 2>의 (1)에서 사용한 2-(3-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 대신에 2-(4-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진을 넣어주고 <실시예 2>의 (1)과 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 4]로 표시되는 화합물 1.32 g을 얻었다. (수율 72%)

[0273] <실시예 4> [화학식 20]으로 표시되는 화합물의 합성

[0274] (1) [화학식 4-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0275] 하기 [반응식 9]에 의하여 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0276] [반응식 9]



[0277]

[0278] [화학식 1-c]

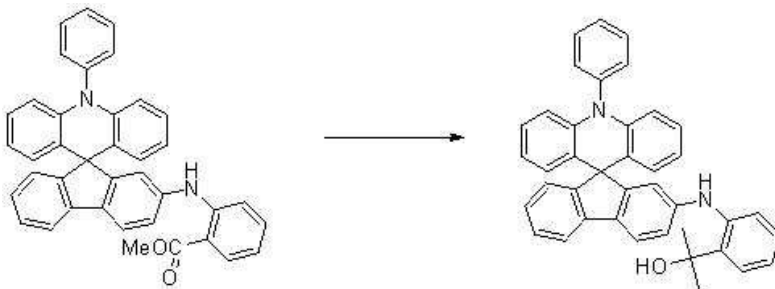
[화학식 4-a]

[0279] <실시예 1>의 (3)으로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 23.0 g (47.3 mmol), 2-아미노-메틸벤조에이트 7.1 g (47.3 mmol), 팔라듐 아세테이트 0.11 g (0.47 mmol), 잔트포스 0.81 g (1.4 mmol), 세슘카보네이트 18.35 g (56.8 mmol)을 톨루엔 230 ml에 넣고 24시간동안 교반, 환류시켰다. 반응이 종료되면 필터 후 용액을 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 그리고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물 21.7 g을 얻었다. (수율 83%)

[0280] (2) [화학식 4-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0281] 하기 [반응식 10]에 의하여 [화학식 4-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0282] [반응식 10]



[0283]

[0284] [화학식 4-a]

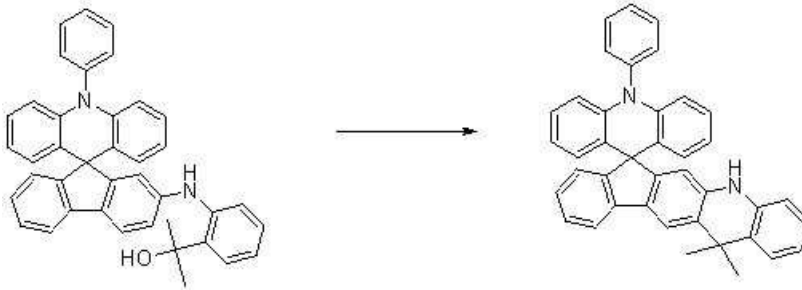
[화학식 4-b]

[0285] 상기 [반응식 9]로부터 얻은 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물 21.7 g (39.0 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 200 ml에 녹인 후 0 °C에서 교반하면서 메틸 마그네슘 브로마이드 39 ml (117 mmol)를 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 상온에서 24시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 2N 염산 수용액을 넣어주고 여과하여 여액을 에틸아세테이트로 추출 후 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 4-b]로 표시되는 화합물 16.3 g을 얻었다. (수율 75%)

[0286] (3) [화학식 4-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0287] 하기 [반응식 11]에 의하여 [화학식 4-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0288] [반응식 11]



[0289]

[0290] [화학식 4-b]

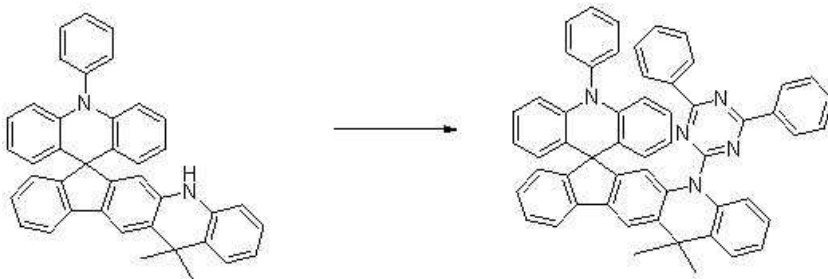
[화학식 4-c]

[0291] 상기 [반응식 10]으로부터 얻은 [화학식 4-b]로 표시되는 화합물 16.3 g (29.3 mmol)을 인산 330 ml에 녹인 후 상온에서 24 시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 메틸렌클로라이드와 물로 추출하여 유기층을 분리하고 마그네슘 설페이트 처리 후 농축시킨다. 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리한 후 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 4-c]로 표시되는 화합물 5.21 g을 얻었다. (수율 33%)

[0292] (4) [화학식 20]으로 표시되는 화합물의 합성

[0293] 하기 [반응식 12]에 의하여 [화학식 20]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0294] [반응식 12]



[0295]

[0296] [화학식 4-c]

[화학식 20]

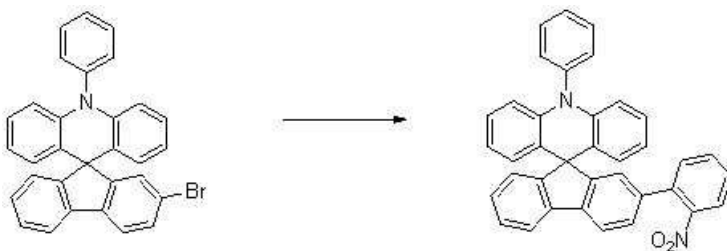
[0297] <실시예1>의 (5)로부터 얻은 [화학식 1-e] 화합물 대신에 상기 [반응식 11]로부터 얻은 [화학식 4-c]로 표시되는 화합물 5.21 g (29.68 mmol)을 넣어주고 <실시예1>의 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 20]로 표시되는 화합물 14.17 g을 얻었다. (수율 6%)

[0298] <실시예 5> [화학식 38]로 표시되는 화합물의 합성

[0299] (1) [화학식 5-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0300] 하기 [반응식 13]에 의하여 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0301] [반응식 13]



[0302]

[0303] [화학식 1-c]

[화학식 5-a]

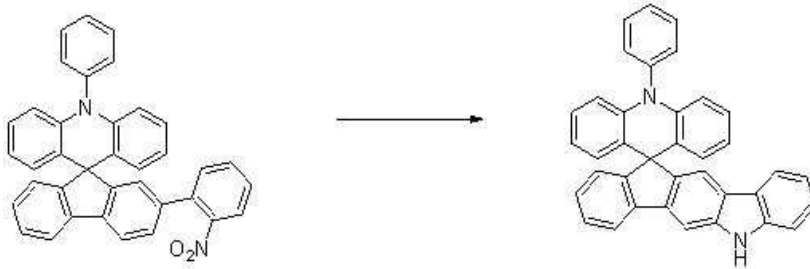
[0304] <실시예 1>의 (3)으로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 23.0 g (47.3 mmol), 2-나이트로페닐 보론산

6.6 g (39.4 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.9 g (0.79 mmol), 포타슘카보네이트 10.9 g (78.8 mmol), 톨루엔 120 ml, 다이옥산 120 ml, 물 50 ml에 넣고 24시간동안 교반, 환류시켰다. 반응이 종료되면 필터 후 여액을 추출하여 유기층을 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 그리고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물 10.4 g을 얻었다. (수율 50 %)

[0305] (2) [화학식 5-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0306] 하기 [반응식 14]에 의하여 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0307] [반응식 14]



[0308]

[0309] [화학식 5-a]

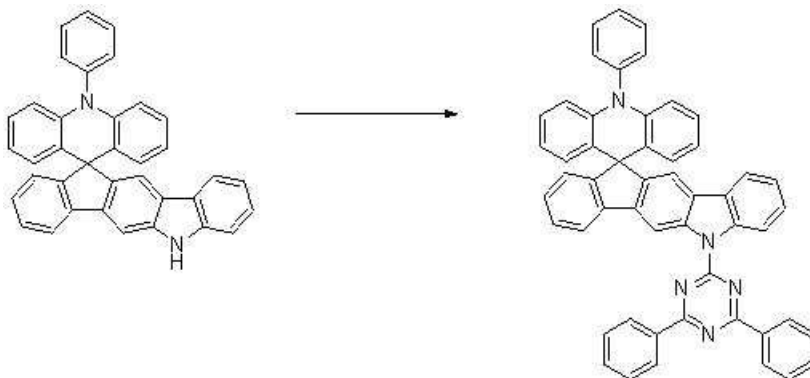
[화학식 5-b]

[0310] 상기 [반응식 13]으로부터 얻은 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물 10.4 g (19.7 mmol), 트리페닐포스핀 15.5 g (59.1 mmol)을 디클로로벤젠 100 ml를 넣고 24시간동안 환류, 교반했다. 반응이 종료되면 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 그리고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물 4.9 g을 얻었다. (수율 50 %)

[0311] (3) [화학식 38]로 표시되는 화합물의 합성

[0312] 하기 [반응식 15]에 의하여 [화학식 38]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0313] [반응식 15]



[0314]

[0315] [화학식 5-b]

[화학식 38]

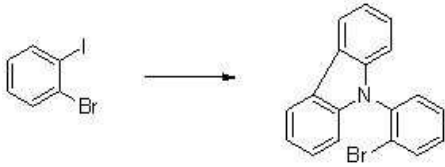
[0316] 상기 [반응식 14]로부터 얻은 [화학식 5-b] 화합물 4.9 g (9.85 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 0.28 g (11.82 mmol)을 디메틸포름아마이드 100 ml에 넣고 상온에서30분 동안 교반시킨다. 그 후 클로로디페닐트리아진 3.16 g (11.82 mmol)을 디메틸포름아마이드 100 ml에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 80 ml를 첨가해주고 여과 후 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 38]로 표시되는 화합물 4.4 g을 얻었다. (수율 62 %)

[0317] <실시예 6> [화학식 74]로 표시되는 화합물의 합성

[0318] (1) [화학식 6-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0319] 하기 [반응식 16]에 의하여 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0320] [반응식 16]



[0321]

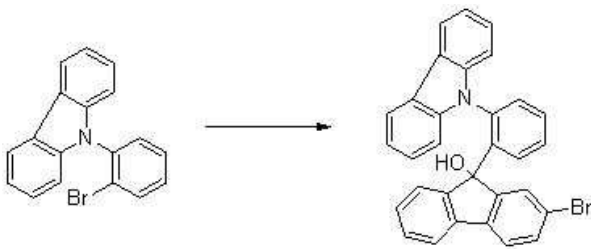
[0322] [화학식 6-a]

[0323] <실시예1>의 (1)에서 사용한 디페닐아민 대신에 카바졸 69.17 g (413.7 mmol)을 넣어주고 <실시예1>의 (1)과 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물 45.32 g을 얻었다. (수율 34%)

[0324] (2) [화학식 6-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0325] 하기 [반응식 17]에 의하여 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0326] [반응식 17]



[0327]

[0328] [화학식 6-a]

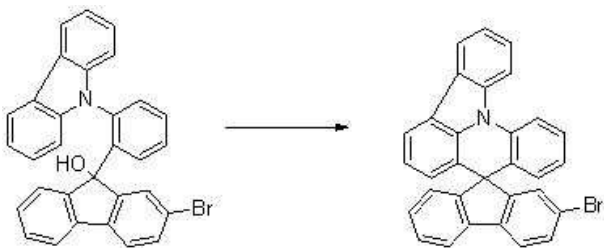
[화학식 6-b]

[0329] <실시예1>의 (1)에서 얻은 [화학식 1-a] 화합물 대신에 상기 [반응식 16]으로부터 얻은 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물 45.32 g (140.66 mmol)을 넣어주고 <실시예1>의 (2)와 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물 43.15 g을 얻었다. (수율 89%)

[0330] (3) [화학식 6-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0331] 하기 [반응식 18]에 의하여 [화학식 6-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0332] [반응식 18]



[0333]

[0334] [화학식 6-b]

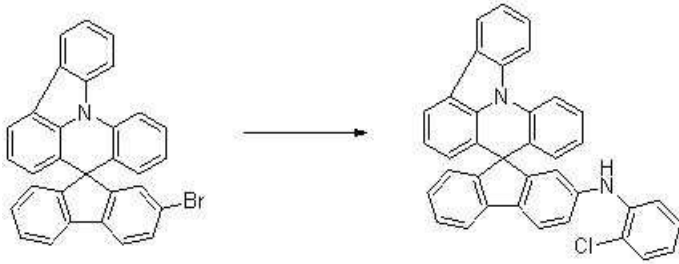
[화학식 6-c]

[0335] <실시예1>의 (2)에서 얻은 [화학식 1-b] 화합물 대신에 상기 [반응식 17]로부터 얻은 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물 43.15 g (85.89 mmol)을 넣어주고 <실시예1>의 (3)와 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 6-c]로 표시되는 화합물 22.88 g을 얻었다. (수율 55%)

[0336] (4) [화학식 6-d]로 표시되는 화합물의 합성

[0337] 하기 [반응식 19]에 의하여 [화학식 6-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0338] [반응식 19]



[0339]

[0340] [화학식 6-c]

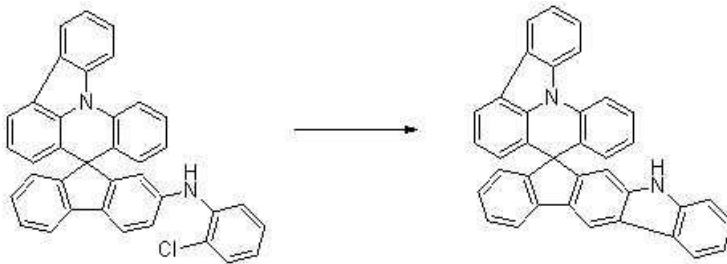
[화학식 6-d]

[0341] <실시예1>의 (3)에서 얻은 [화학식 1-c] 화합물 대신에 상기 [반응식 18]로부터 얻은 [화학식 6-c]로 표시되는 화합물 22.88 g (47.24 mmol)을 넣어주고 <실시예1>의 (4)와 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 6-d]로 표시되는 화합물 11.54 g을 얻었다. (수율 46%)

[0342] (5) [화학식 6-e]로 표시되는 화합물의 합성

[0343] 하기 [반응식 20]에 의하여 [화학식 6-e]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0344] [반응식 20]



[0345]

[0346] [화학식 6-d]

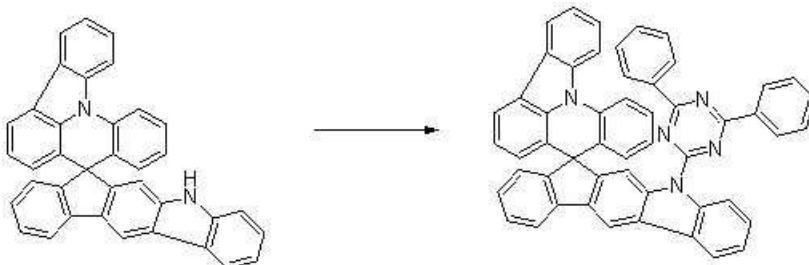
[화학식 6-e]

[0347] <실시예1>의 (4)에서 얻은 [화학식 1-d] 화합물 대신에 상기 [반응식 19]로부터 얻은 [화학식 6-d]로 표시되는 화합물 11.54 g (21.73 mmol)을 넣어주고 <실시예1>의 (5)와 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 6-e]로 표시되는 화합물 1.18 g을 얻었다. (수율 11%)

[0348] (6) [화학식 74]로 표시되는 화합물의 합성

[0349] 하기 [반응식 21]에 의하여 [화학식 74]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0350] [반응식 21]



[0351]

[0352] [화학식 6-e]

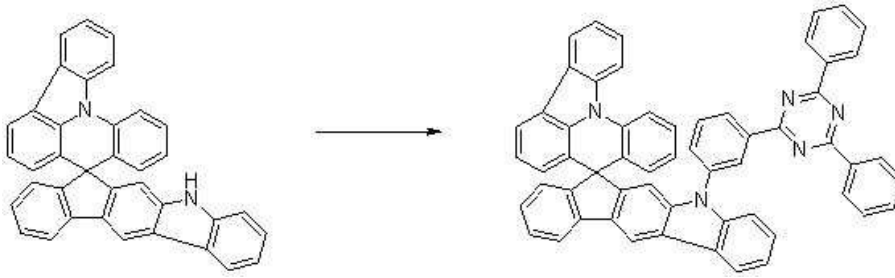
[화학식 74]

[0353] <실시예1>의 (5)에서 얻은 [화학식 1-e] 화합물 대신에 상기 [반응식 20]로부터 얻은 [화학식 6-e]로 표시되는 화합물 1.18 g (2.39 mmol)을 넣어주고 <실시예1>의 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 74]로 표시되는 화합물 1.08 g을 얻었다. (수율 62%)

[0354] <실시예 7> [화학식 76]으로 표시되는 화합물의 합성

[0355] 하기 [반응식 22]에 의하여 [화학식 76]으로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0356] [반응식 22]



[0357]

[0358] [화학식 6-e]

[화학식 76]

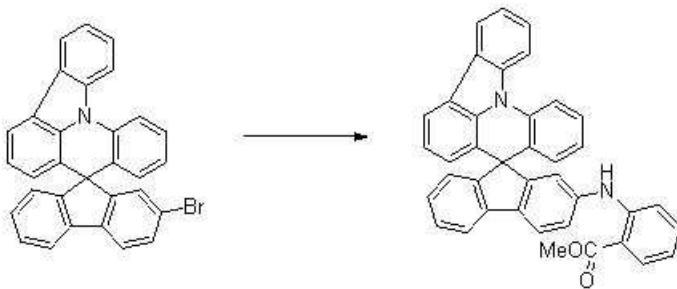
[0359] <실시예1>의 (5)에서 얻은 [화학식 1-e] 화합물 대신에 <실시예6>의 (5)에서 얻은 [화학식 6-e]로 표시되는 화합물 1.18 g (2.39 mmol)을 넣어주고 <실시예2>의 (1)과 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 76]으로 표시되는 화합물 1.19 g을 얻었다. (수율 62%)

[0360] <실시예 8> [화학식 83]으로 표시되는 화합물의 합성

[0361] (1) [화학식 8-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0362] 하기 [반응식 23]에 의하여 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0363] [반응식 23]



[0364]

[0365] [화학식 6-c]

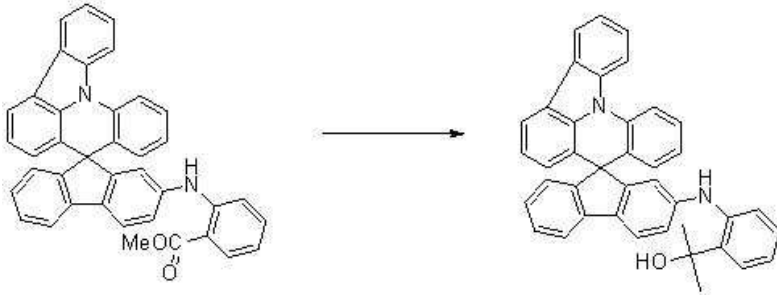
[화학식 8-a]

[0366] <실시예 6>의 (3)으로부터 얻은 [화학식 6-c]로 표시되는 화합물 23.0 g (47.3 mmol), 2-아미노-메틸벤조에이트 7.1 g (47.3 mmol), 팔라듐 아세테이트 0.11 g (0.47 mmol), 잔트포스 0.81 g (1.4 mmol), 세슘카보네이트 18.35 g (56.8 mmol)을 톨루엔 230 ml에 넣고 24시간동안 교반, 환류시켰다. 반응이 종료되면 필터 후 용액을 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 그리고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물 21.7 g을 얻었다. (수율 83 %)

[0367] (2) [화학식 8-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0368] 하기 [반응식 24]에 의하여 [화학식 8-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0369] [반응식 24]



[0370]

[0371] [화학식 8-a]

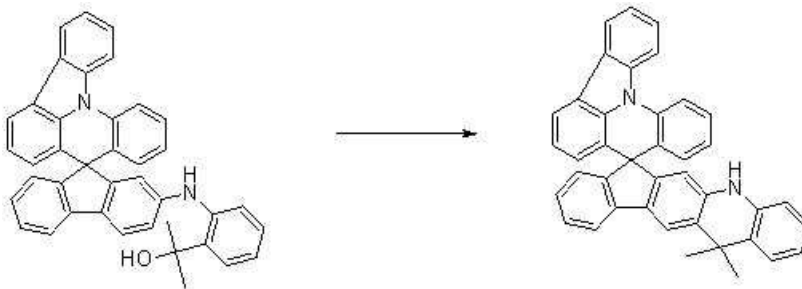
[화학식 8-b]

[0372] 상기 [반응식 23]으로부터 얻은 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물 21.7 g (39.0 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 200 ml에 녹인 후 0 °C에서 교반하면서 메틸 마그네슘 브로마이드 39 ml (117 mmol)를 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 상온에서 24시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 2N 염산 수용액을 넣어주고 여과하여 여액을 에틸아세테이트로 추출 후 농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 8-b]로 표시되는 화합물 16.3 g을 얻었다. (수율 75 %)

[0373] (3) [화학식 8-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0374] 하기 [반응식 25]에 의하여 [화학식 8-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0375] [반응식 25]



[0376]

[0377] [화학식 8-b]

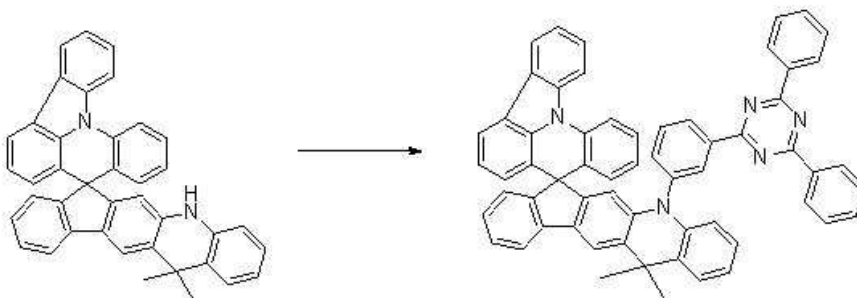
[화학식 8-c]

[0378] 상기 [반응식 24]로부터 얻은 [화학식 8-b]로 표시되는 화합물 16.3 g (29.3 mmol)을 인산 330 ml에 녹인 후 상온에서 24 시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 메틸렌클로라이드와 물로 추출하여 유기층을 분리하고 마그네슘 설페이트 처리 후 농축시킨다. 메틸렌클로라이드와 헥산으로 컬럼 크로마토그래피로 분리한 후 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 8-c]로 표시되는 화합물 5.21 g을 얻었다. (수율 33 %)

[0379] (4) [화학식 8-d]로 표시되는 화합물의 합성

[0380] 하기 [반응식 26]에 의하여 [화학식 8-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0381] [반응식 26]



[0382]

[0383] [화학식 8-c]

[화학식 83]

[0384] <실시예1>의 (5)로부터 얻은 [화학식 1-e] 화합물 대신에 상기 [반응식 25]로부터 얻은 [화학식 8-c]로 표시되

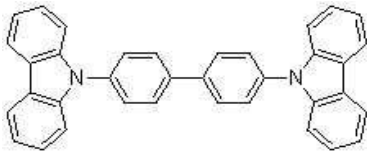
는 화합물 5.21 g (29.68 mmol)을 넣어주고 <실시예2>의 (1)과 동일한 방법으로 합성하여 [화합식 83]으로 표시되는 화합물 14.17 g을 얻었다. (수율 62 %)

[0385] **실시예 : 유기 발광다이오드의 제조**

[0386] ITO 글래스의 발광 면적이 2 mm × 2 mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1x10<sup>-6</sup> torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD(700Å), NPD(300Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물 + Ir(ppy)<sub>3</sub> (10%)(300Å), Alq<sub>3</sub> (350Å), LiF(5Å), Al(1,000Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA에서 측정을 하였다.

[0387] **비교예**

[0388] 비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 CBP를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였으며 상기 CBP의 구조는 아래와 같다.



[0390] <CBP>

**표 1**

구분	호스트	도펀트	도핑농도%	V	Cd/m <sup>2</sup>	CIEx	CIEy	T <sub>80</sub> (Hr)
비교예1	CBP	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	7.9	3800	0.297	0.624	68
실시예1	2	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.8	5020	0.311	0.621	201
실시예2	3	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	4.2	5100	0.313	0.620	182
실시예3	4	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	4.3	5090	0.313	0.624	193
실시예4	20	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	4.1	5130	0.307	0.623	179
실시예5	38	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.7	5100	0.309	0.614	173
실시예6	56	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.9	5230	0.312	0.621	218
실시예7	74	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.9	5120	0.311	0.622	203
실시예8	83	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	4.1	5290	0.310	0.625	189
실시예9	5	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.8	5180	0.309	0.621	180
실시예10	13	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.8	4900	0.308	0.623	235
실시예11	14	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.5	5210	0.309	0.622	267
실시예12	15	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	4.2	5270	0.313	0.621	253
실시예13	16	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	4.1	5130	0.314	0.626	188
실시예14	21	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.7	4820	0.308	0.624	199
실시예15	22	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	3.6	5200	0.315	0.623	203
실시예16	76	Ir(ppy) <sub>3</sub>	10	4.0	5110	0.311	0.622	203

[0392] 상기 [표 1]에서 보는 바와 같이 본 발명에 의하여 확보된 유기화합물은 인광 발광성 호스트 재료로 많이 쓰이

는 호스트물질 중 CBP에 비하여 낮은 구동전압과 높은 발광효율 그리고 장수명을 가진다.

[0393] 또한, 본 발명의 범위(상기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2])에 포함되는 화합물 또는 이들의 조합이라 하더라도 일부 화합물이 고온에서의 발광 균일성이 확보되지 않은 문제가 발생할 수도 있음에 비해, 위 [화학식 2] 내지 [화학식 101]의 화합물은 고온에서의 매우 우수한 발광 균일성도 확보될 수 있을 뿐만 아니라, 장시간(예: 100 시간 이상) 전계 인가 후에도 면적 및 시간 기준으로 발광 균일성이 저하되지 않는다는 점에서, 위 [화학식 2] 내지 [화학식 101]의 화합물은 고온 발광 균일성 및 100 시간 이상의 장시간 운전 후에도 면적 및 시간을 기준으로 하는 발광 균일성이 확보된다는 특이 효과를 보임을 확인하였다.

[0394] 뿐만 아니라, 본 발명의 범위(상기 [화학식 1-1] 또는 [화학식 1-2])에 포함되는 화합물의 조합이라고 하더라도 별도의 증점제를 사용하지 않고는 7 cP 이상의 점도를 발현할 수 없어 용액 도포법에 의한 막 형성이 대부분 불가능하였으나, 위에서 열거한 화학식 2, 3, 4, 20, 38, 56, 74, 76, 5, 13, 14, 15, 16, 21, 22, 75 중에서 선택된 1종 또는 이들의 혼합물을 사용하는 경우, 별도의 증점제를 사용하지 않고도 7 cP 이상의 점도를 발현할 수 있어 용액 도포법에 의한 막 형성이 가능하다는 효과를 확인하였다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020140076522A</a>	公开(公告)日	2014-06-20
申请号	KR1020130154822	申请日	2013-12-12
[标]申请(专利权)人(译)	SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
[标]发明人	LEE SE JIN 이세진 KIM SU JIN 김수진		
发明人	이세진 김수진		
IPC分类号	C09K11/06 C07D471/10 C07D403/10 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1062 C09K2211/1066 H01L51/0071 H01L51/50 H05B33/14		
优先权	1020120144416 2012-12-12 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明涉及电致发光化合物和包含该化合物的电致发光器件。根据本发明的电致发光化合物具有改善的热稳定性，空穴和电子传输性能，功率效率和驱动电压特性，并且防止由于空间位阻和分子缔合引起的浓度猝灭的问题。

